



**Universidade de Brasília - UnB  
Faculdade UnB Gama - FGA  
Engenharia de Energia**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA  
COMBUSTÃO GASOSA LAMINAR SEM PRÉ-  
MISTURA**

**Autor: Diego Gonçalves Duarte  
Orientador: Fábio Alfaia da Cunha**

**Brasília, DF  
2015**



**Diego Gonçalves Duarte**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA COMBUSTÃO GASOSA LAMINAR  
SEM PRÉ-MISTURA**

Monografia submetida ao curso de graduação em Engenharia de Energia da Universidade de Brasília, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia de Energia.

Orientador: Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha

**Brasília, DF  
2015**

## **CIP – Catalogação Internacional da Publicação**

Duarte, Diego Gonçalves.

Modelagem e simulação numérica da combustão gasosa laminar sem pré-mistura / Diego Gonçalves Duarte.  
Brasília: UnB, 2015.

Monografia (Graduação) – Universidade de Brasília  
Faculdade do Gama, Brasília, 2015. Orientação: Fábio Alfaia da Cunha.

1. Combustão sem pré-mistura. 2. chama laminar. 3. simulação numérica I. Cunha, Fábio Alfaia da. II. Título.

CDU Classificação

# **MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA COMBUSTÃO GASOSA LAMINAR SEM PRÉ-MISTURA**

**Diego Gonçalves Duarte**

Monografia submetida como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia de Energia da Faculdade UnB Gama - FGA, da Universidade de Brasília, em (30/06/2015) apresentada e aprovada pela banca examinadora abaixo assinada:

---

**Prof. Dr.: Fábio Alfaia da Cunha, UnB/ FGA**  
Orientador

---

**Prof. Dr.: Augusto César de Mendonça Brasil, UnB/ FGA**  
Membro Convidado

---

**Prof. Dra.: Juliana Petrocchi Rodrigues, UnB/ FGA**  
Membro Convidado

Brasília, DF  
2015

## **AGRADECIMENTOS**

Ao meu orientador, Professor Fábio Alfaia da Cunha, que por meio da sua sabedoria, entusiasmo e orientação me guiou na realização desse trabalho.

A minha família pelo apoio incondicional.

Aos vários amigos da Faculdade UnB Gama que me incentivaram, acompanharam e agregaram ao meu desenvolvimento acadêmico e pessoal.

Aos amigos feitos durante intercâmbio acadêmico na Technische Hochschule Deggendorf, Deggendorf, Alemanha pelos momentos e conhecimentos compartilhados.

“Descobri como é bom chegar quando se tem paciência. E para se chegar, onde quer que seja, aprendi que não é preciso dominar a força, mas a razão. É preciso, antes de mais nada, querer”. Amyr Klink

## RESUMO

O presente trabalho apresenta a comparação entre dois modelos de combustão gasosa laminar sem pré-mistura em dois níveis de complexidade diferentes. Metano e ar são usados como combustível e oxidante, respectivamente. O primeiro método assume química infinitamente rápida, adotada pelo Modelo Folha de Chama. O método mais complexo, nomeado como Modelo de Taxa Química Finita, usa o mecanismo quasi global para descrever as reações químicas. Para a modelagem, equações diferenciais para massa, energia e quantidade de movimento (em geometria bidimensional axissimétrica) são resolvidas numericamente pelo Método de Volume de Controle de Elementos Finitos. O código utilizado foi programado para a linguagem do software MATLAB. Alguns resultados obtidos pela simulação numérica são comparados com dados experimentais e foi observada boa acurácia nos perfis de temperatura, velocidade e fração molar.

**Palavras-chave:** Combustão sem pré-mistura. Chama laminar. Simulação numérica.

## **ABSTRACT**

This work presents a comparison between two models of non pre-mixed laminar gas combustion with different complexity levels. Methane and air are used as fuel and oxidant, respectively. The first method assuming infinitely fast chemistry, adopted for the Flame Sheet Model. The most complex, named Finite Rate Chemistry Model, uses the quasi-global mechanism to describe the chemical reactions. To modeling, a set of differential equations for mass, energy and momentum (two dimensional axisymmetric geometry), unsteady, are solved numerically by a Control Volume Finite Element Method. The numeric code was programmed in MATLAB language. Some results obtained by numerical simulation are compared with experimental data and good agreement is observed for the prediction of temperature, velocity and mole fraction profiles.

**Keywords:** Non pre-mixed combustion. Laminar flame. Numeric simulation.



## LISTA DE FIGURAS

Figura 4.1 – Fração de massa das espécies químicas e temperatura.....	18
Figura 4.2 - Vista esquemática da câmara de combustão do laboratório, destacando os cilindros concêntricos (Mitchell et al. 1975).....	22
Figura 4.3 - Vista esquemática da placa de injeção de combustível e oxidante do combustor (Mitchell et al. 1975).....	23
Figura 4.4 – Esquema chama laminar difusa na câmara de combustão. (Mitchell et al. 1975).....	23
Figura 4.5 – Geometria simplificada bidimensional axissimétrica da câmara de combustão utilizada nas simulações.....	24
Figura 4.6 - Malha 2: Média.....	30
Figura 4.7 - Malha 2: Média (aproximação da entrada de combustível e oxidante).....	31
Figura 4.8 – (a) Temperatura e (b) Componente axial de velocidade no comprimento $Z=1,2$ cm - teste espacial de malha.....	32
Figura 4.9 – (a) Temperatura e (b) Componente axial de velocidade no comprimento $Z=2,4$ cm - teste espacial de malha.....	32
Figura 4.10 – (a) Temperatura e (b) Componente axial de velocidade no comprimento $Z=5,0$ cm - teste espacial de malha.....	33
Figura 4.11 – (a) Temperatura e (b) Componente axial de velocidade eixo de simetria - teste espacial de malha.....	33
Figura 4.12 - Tempo gasto pela CPU para simulação.....	34
Figura 4.13 - Comparação de perfis em $z=1,2$ cm. (a) Fração molar de $CH_4$ (b) Fração molar de $O_2$ . Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	36
Figura 4.14 - Comparação de perfis em $z=2,4$ cm. (a) Fração molar de $CH_4$ (b) Fração molar de $O_2$ . Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	37
Figura 4.15 – Comparação de perfis em $z=5,0$ cm. (a) Fração molar de $CH_4$ (b) Fração molar de $O_2$ . Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	38
Figura 4.16 - Comparação de perfis em $z=1,2$ cm. (a) Fração molar de $N_2$ . Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	38
Figura 4.17 - Comparação de perfis em $z=2,4$ cm e $z=5,0$ . (a) e (b) Fração molar de $N_2$ . Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	39
Figura 4.18 - Comparação de perfis em $z=1,2$ cm. (a) Fração molar $H_2O$ (b) Fração molar de $CO_2$ . Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	39
Figura 4.19 - Comparação de perfis em $z=2,4$ cm. (a) Fração molar $H_2O$ (b) Fração molar $CO_2$ . Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	40
Figura 4.20 - Comparação de perfis em $z=5,0$ cm. (a) Fração molar $H_2O$ (b) Fração molar de $CO_2$ . Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	41
Figura 4.21 - Comparação de perfis em $z=1,2$ cm e $z=5,0$ cm. (a) e (b) Componente radial de velocidade. Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	42
Figura 4.22 - Comparação de perfis no eixo de simetria. (a) Componente axial de velocidade (b) Temperatura. Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	42
Figura 4.23 – Campo vetorial de velocidades para os dois modelos de combustão.....	43
Figura 4.24 - Comparação de perfis em $z=1,2$ cm e $z=5,0$ cm. (a) e (b) Temperatura. Dados experimentais Mitchell et al. (1980).....	44
Figura 4.25 - Chama em regime permanente em 2s de simulação. (a) Temperatura (K), Método Folha de Chama e (b) Temperatura (K), Método Taxa Finita.....	44
Figura 4.26 - Campo de temperatura variando no tempo; (a) 0,01 s, (b) 0,09 s, (c) 0,17 s, (d) 0,25 s, (e) 0,33 s, (f) 0,41 s, (g) 0,49 s, (h) 0,57 s e (i) 0,65 s - Método Folha de Chama.....	46

## LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 - Mecanismo Quasi Global para reações homogêneas.....	19
Tabela 4.2 - Condições de contorno, CC e condições iniciais, CI.....	25
Tabela 4.3 - Condições de entrada.....	25
Tabela 5.1 - Parâmetros das malhas utilizadas na simulação.....	29

## SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
<b>2. OBJETIVOS .....</b>	<b>4</b>
2.1. GERAL.....	4
2.2. ESPECÍFICOS.....	4
<b>3.FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA .....</b>	<b>5</b>
3.1 ASPECTOS GERAIS DA COMBUSTÃO .....	5
3.1.1 Chama pré-misturada e não pré-misturada .....	5
3.1.2 Laminar e/ou Turbulenta.....	6
3.2 MODELOS DE COMBUSTÃO.....	7
3.3 ESTRUTURA DA CHAMA.....	9
3.3.1 Tipos básicos de chamas .....	9
3.3.2 Chama laminar sem pré-mistura.....	9
3.3.3 Chama turbulenta sem pré-mistura .....	10
3.3.4 Chama laminar híbrida sem pré-mistura.....	10
3.4 CARACTERÍSTICAS VISÍVEIS DA CHAMA .....	10
<b>4. METODOLOGIA NÚMERICA .....</b>	<b>11</b>
4.1. MODELAGEM DO ESCOAMENTO LAMINAR .....	11
4.2 MODELO DE TAXA QUÍMICA INFINITA (MODELO FOLHA DE CHAMA).....	12
4.2.1 O Sistema de Reação Química Simples.....	12
4.3 MODELO DE TAXA FINITA .....	19
4.4 PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS .....	21
4.5. CASO TESTE .....	22
4.6 CONDIÇÕES DE CONTORNO E INICIAIS.....	25
4.7 PROCESSAMENTO .....	26
4.7.1 Descrição das funções utilizadas no código .....	26
4.7.2 Código de simulação para o modelo folha de chama.....	28
4.7.2.1 Esquema de solução .....	28
4.7.3 Código de simulação para o modelo de taxa química finita .....	28
4.7.3.1 Esquema de solução .....	29
<b>5.0 RESULTADOS .....</b>	<b>30</b>
5.1 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DE MALHA .....	30
5.1.1 Independência de malha espacial .....	30
5.2 ANÁLISE E DISCURSÃO DOS RESULTADOS.....	36
<b>6. CONSIDERAÇÕES FINAIS .....</b>	<b>47</b>
6.1 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	47
<b>7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>49</b>

## 1. INTRODUÇÃO

A combustão é a tecnologia mais antiga da humanidade e tem sido usada por mais de 1 milhão de anos e isso justifica a sua importância em ser estudada Warnatz *et al.* (2006).

Como consta no relatório de balanço energético 2014 - ano base 2013, a oferta interna de energia do Brasil é composta de 8,3% lenha e carvão vegetal, 12,5% hidráulica, 1,3 urânio, 5,6% carvão mineral e coque, 12,8% gás natural, 16,1% derivados de cana, 39,3% petróleo e derivados e 4,2% outras renováveis. Com base nisso observa-se o quanto o processo de combustão exerce papel importante na matriz energética, principalmente levando em consideração que os principais subprodutos do petróleo, que corresponde a grande parte, são óleo diesel, óleo combustível, gasolina, querosene, entre outros.

Conforme Dreizler e Janicka (2007), mais de 80% da energia primária é convertida pelo processo de combustão. Nesse papel dominante da combustão para produção de energia, deseja-se que os esforços sejam para a substituição por fontes renováveis em um futuro próximo. Para exemplificar, em um cenário próximo, de acordo com a Agência Internacional de Energia, em 2020 ainda 80% da necessidade energética será suprida por combustíveis fósseis. Diante deste fato é necessário observar alguns aspectos como a tecnologia da câmara de combustão, seus componentes e recursos ambientais relacionados. O tipo de preparo da mistura e o gerenciamento da combustão representam consideravelmente a eficiência energética e a formação de poluentes do processo.

Problemas práticos que envolvem o fenômeno da combustão podem ser subdivididos em 5 grandes áreas segundo Law (2006). Essas são: energia pela combustão, combustão, poluição e saúde, segurança e defesa, e espaço. A fonte predominante a nível mundial é advinda da queima de combustíveis fósseis e a tendência é a continuidade devido a motivos de comodidade, alta densidade energética e valor comercial. Há alguns anos aconteceu uma crise energética, mas se analisado a fundo, poderia ter sido nomeada como crise do combustível. Atrelado a isso existe a questão dos poluentes advindos da queima dos hidrocarbonetos, que afetam desde casas (por conter isolamento para conservação de energia) a camada de ozônio, agravando o aquecimento global. Além disso, incêndios e explosões são outras ocorrências frequentes no nosso dia a dia, comprometendo a segurança.

Levando para esfera estatal e tecnológica a formulação de munição de alta energia e propulsão, são fatores que concernem a defesa nacional de um país.

Um outro problema indicado por Westbrook e Dryer (1981) na maioria dos sistemas de combustão é a propagação de chama. A utilização de modelos reais podem fazer uso da cinética química detalhada para sanar esse problema e tem desenvolvido avanços significativos na estrutura das chamas. Há casos onde existe a necessidade para aplicação de modelos confiáveis para oxidação de combustíveis que são simples e não precisam da sofisticação e nível de complexidade dos mecanismos de reação detalhada e a grande quantidade química que ele utiliza e ainda assim reproduzem o fenômeno experimental de propagação de chama.

Devido à vastidão e complexidade desse tema, existe área de conhecimento, como por exemplo, engenharia de reação, na qual analisa essas transformações onde ocorrem diversos processos químicos, de tal forma que os reagentes devam entrar em contato (para permitir que as reações aconteçam) criando um ambiente adequado (temperatura e campos de concentração ideais) para que no tempo certo consiga ser feita a remoção dos produtos. Esse campo de conhecimento inclui todas as atividades necessárias para desenvolver as melhores opções de hardware e protocolos de reação para obter as transformações desejadas. Para desempenhar essa função é requerido o domínio de conhecimento como termodinâmica, catálise, dinâmica dos fluidos, transferências de mistura, calor e massa (Ranade, 2002).

Pesquisas sobre combustão, no passado, tinham como foco a mecânica dos fluidos, incluindo a transferência de calor por reações químicas. O calor era descrito de forma simples com a ajuda da termodinâmica, a qual assumia a reação química como infinitesimalmente rápida. Essa abordagem é útil para fenômenos estacionários, entretanto não satisfatória para sistemas transientes (Warnatz *et al* 2006).

Segundo o descrito em Turns (2013), a combustão pode ocorrer como forma de chama ou não, sendo a chama pré-misturada ou não pré-misturada (difusiva). A diferença advém da centelha de ignição. As duas classes de chamas, com pré-mistura e sem pré-mistura (difusiva) são relacionadas ao estado de interação dos reagentes. No primeiro caso, combustível e oxidante são misturados previamente em nível molecular para ocorrência significativa de reação química. De forma oposta, no segundo caso, os reagentes são inicialmente separados e a reação só ocorre na interface entre combustível e oxidante quando a mistura e a reação acontecem

concomitantemente. Um exemplo clássico de chama sem pré-mistura é a chama de uma vela, já em alguns dispositivos, os dois tipos de chamas podem estar presentes em diferentes níveis. Outro exemplo, segundo Peters (1992), para combustão sem pré-mistura é o motor a diesel, onde jato de combustível líquido é injetado dentro de um cilindro com ar comprimido quente.

De acordo com Peters (1992), ótimas condições para a combustão sem pré-mistura estão na vizinhança da superfície da mistura estequiométrica. Essa é a superfície onde o combustível e oxidante existem em proporções que permite os dois serem completamente consumidos. Isso levará a uma máxima temperatura da chama e por isso a sensibilidade de temperatura das reações químicas para taxas de reações são mais rápidas. Na maioria dos casos, a combustão é mais rápida que a difusão e a difusão é a barreira limitadora que controla todo o processo. É devido a isso que nesses tipos de chamas, onde os reagentes não são pré-misturados, são chamados de chamas difusivas.

Muitos combustíveis líquidos e gasosos utilizados nas aplicações industriais para geração de energia elétrica e de transporte, como gasolina e óleo diesel, são de fato misturados, contendo diversos hidrocarbonetos. Turns (2013) e Bollig *et al.* (1998) ainda acrescentam que um procedimento para modelar a combustão desses combustíveis é considerar uma única espécie química, ou empregar uma mistura de pequeno número de espécies químicas que reproduzam muitas das características mais importantes do combustível que se deseja modelar. Para o combustível gás natural, as misturas substitutas simplificadas que conservam as principais características são: metano ( $CH_4$ ), Etano ( $C_2H_6$ ) e Propano ( $C_3H_8$ ). Além disso a cinética química do metano é provavelmente a mais estudada e, portanto, a mais bem conhecida.

## **2. OBJETIVOS**

### **2.1. GERAL**

Modelar e simular a combustão gasosa laminar sem pré-mistura de metano.

### **2.2. ESPECÍFICOS**

Entender o funcionamento do fenômeno da combustão, descrever em detalhe o Método de Folha de Chama e o Método de Taxa Finita. Mostrar os passos necessários para, a partir da fração de mistura, calcular o campo de temperatura e campo de fração de espécies químicas. Determinar por meio do teste de malha qual a malha com menor custo (tempo) e melhor benefício (resultados) para ser aplicada na simulação computacional. Comparar o Método de Taxa Finita e o Método de Folha de Chama de acordo com os resultados obtidos. Avaliar os resultados obtidos pelos dois métodos e confirmar se ambos são consistentes com dados experimentais disponíveis na literatura e definir para qual finalidade cada método têm melhor aplicação.

### **3.FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA**

#### **3.1 ASPECTOS GERAIS DA COMBUSTÃO**

A definição dada por Law (2006) para combustão é o estudo de escoamentos com reações químicas rápidas e altamente exotérmicas. A mesma pode ser classificada em alguns aspectos fundamentais, sugeridos por Law (2006) e Turns (2013).

##### **3.1.1 Chama pré-misturada e não pré-misturada**

Essa é provavelmente a classificação mais importante do fenômeno. De forma geral o sistema de combustão consiste em dois reagentes: combustível e oxidante, onde os dois devem ser postos juntos e misturados em nível molecular antes da reação ocorrer. Entretanto o mecanismo de reação pode influenciar a combustão. O pré-requisito da mistura também implica que pelo menos em que um dos reagentes esteja na fase líquida ou gasosa para que as moléculas possam se espalhar sobre as do outro reagente. Por causa da importância da mistura molecular, o sistema de combustão funciona bem diferente dependendo se os reagentes são misturados antes ou não. Em um sistema pré-misturado, os reagentes são previamente bem misturados antes da reação ser iniciada. Por outro lado em um sistema não pré-misturado os reagentes são inicialmente separados e depois unidos pelo processo molecular de difusão e posteriormente a reação acontece. A combustão sem pré-mistura também é conhecida como combustão difusiva por causa do transporte difusivo ser essencial na eficiência da mistura dos reagentes em nível molecular. É importante ressaltar que um sistema sem pré-mistura difusivo não implica em que um sistema pré-misturado seja não difusivo. A palavra difusivo somente indica a necessidade de junção dos reagentes para o transporte da pré-mistura (e a energia térmica e os produtos da combustão fora) para a região de reação onde os reagentes são consumidos e a energia térmica e os produtos da combustão sejam gerados. É evidente que não existem muitos exemplos de pré-mistura na natureza, pois eles já teriam previamente reagido mesmo que fosse em uma simples reação. Já para sistemas sem pré-mistura isso é simples. Como o oxigênio presente no ar é um oxidante, todos os materiais que podem queimar com o ar são combustíveis. Exemplos mais comuns são derivados de petróleo e carvão,



materiais celulósicos como papel e tecido, e substâncias metálicas como alumínio e magnésio.

### **3.1.2 Laminar e/ou Turbulenta**

A chama também é caracterizada pela natureza do escoamento, podendo ser laminar ou turbulenta. Em um escoamento laminar distintas linhas de corrente existem para a estrutura, movimento convectivo, onde em um escoamento turbulento tais linhas de corrente não existem, de tal forma que, em qualquer ponto no espaço as quantidades de fluxo variam aleatoriamente no tempo. Versteeg e Malalasekera (2007) define essa característica por meio do número de Reynolds que é uma medida relativa à inércia das forças (associada ao efeito convectivo) e forças viscosas. Para valores abaixo do número de Reynolds crítico, o escoamento é suave e as camadas adjacentes do fluido deslizam de forma organizada. Se as condições de contorno não variam com o tempo, o escoamento é permanente. Esse regime é chamado de escoamento laminar. Para valores do número de Reynolds acima do crítico, uma série de eventos complexos acontecem, levando a uma mudança radical das características do escoamento. No estado final o comportamento do escoamento é aleatório e caótico. O movimento se torna intrinsecamente instável, mesmo com condições de contorno constantes. Esse escoamento é turbulento. A existência de turbulência, segundo Law (2006) geralmente facilitaria um processo de mistura grosseiro e também teria uma influência particularmente em sistemas sem pré-mistura onde a mistura dos reagentes é essencial. A mistura final antes da reação pode acontecer, contudo, deve continuar ocorrendo pelo processo difusivo, independente do escoamento ser laminar ou turbulento.

### 3.2 MODELOS DE COMBUSTÃO

Filho (2011) define modelos de combustão como representações de modelos químicos, onde os efeitos das reações determinam e descrevem os cálculos de um escoamento. Partindo de concentrações das espécies químicas, pressão e temperatura um volume de controle pode ser caracterizado de acordo com um mecanismo cinético químico. Por definição a reação de combustão é exotérmica (libera calor) e isso a torna fonte de calor e de produtos de uma reação, ao mesmo tempo em que é sorvedouro para os reagentes (devido ao consumo dos mesmos). De forma indireta isso faz com que o processo altere as propriedades físicas e de transporte da mistura. A cinética química da combustão é regida pelas equações de reações químicas que descrevem a oxidação do combustível. Dependendo de quantas etapas e quais componentes participarão da reação pode-se definir o seu nível de simplificação. Isso implica diretamente na solução da equação de transporte para cada espécie e na simulação de cada sub reação.

A descrição da combustão pode ser feita em vários passos. Du (2000) e Westbrook e Dryer (1981) mostram as reações de um, dois e seis passos para a combustão do metano:

Para modelo de um passo:



Para modelo de dois passos:



Para modelo de seis passos:





Westbrook e Dryer (1981) descrevem ainda que nos mecanismos simplificados, a maioria das espécies são omitidas, particularmente as de maior radicais de difusão, como:  $H$ ,  $O$  e  $OH$ .

Flogan e Seinfeld (1988) destaca que a vantagem óbvia do modelo de um passo é a sua simplicidade. É muito útil para o cálculo da liberação de calor e análise da estabilidade da chama, mas infelizmente não inclui espécies de hidrocarbonetos intermediários ou monóxido de carbono. Os hidrocarbonetos são rapidamente consumidos durante a combustão, formando  $CO$ ,  $H_2$  e  $H_2O$ . A oxidação de  $CO$  para  $CO_2$  acontece de forma mais lenta. A diferença em taxas de reação pode ser levada em conta usando modelos de dois passos que são um pouco mais complicadas que o modelo de um passo, mas pode separar a oxidação, relativamente devagar, da oxidação de  $CO$  para  $CO_2$  da oxidação mais rápida de hidrocarboneto para  $CO$  e  $H_2O$ .

Como mencionado por Turns (2013), devido à estrutura molecular tetraédrica do metano e com forte energia de ligação entre carbono e hidrogênio, a combustão sem pré-mistura possui alta temperatura de ignição e baixa velocidade de chama e é um componente não reativo para poluição fotoquímica. Caso fosse considerado um método de cinética química, por exemplo, seria necessário considerar 325 reações elementares envolvendo 53 espécies químicas, onde boa parte delas são para os mecanismos de oxidação do  $CO$  e  $H_2$ .

O uso do mecanismo quasi global reduz consideravelmente a complexidade de cálculo cinético desde menores números de passos que são usados para descrever o comportamento de um grande número de reações. Além disso, envolve a maioria das espécies estáveis. Essa redução pode ser muito útil, pois se um mecanismo de combustão é usado, por exemplo, para descrever uma taxa da rede de calor liberado durante a combustão, espécies menores são de pouco interesse e o mecanismo pode ser muito eficiente. As espécies químicas, por outro lado,

influenciam muito a formação de poluentes e essa abordagem pode, entretanto, não fornecer detalhes químicos suficientes para os passos de formação dos mesmos.

### 3.3 ESTRUTURA DA CHAMA

#### 3.3.1 Tipos básicos de chamas

Segundo Warnatz (2006) em processos de combustão, combustível e oxidante (geralmente ar) são misturados e queimam. É útil identificar algumas categorias que são baseadas se o combustível e o oxidante são misturados antes (pré-misturado) e depois queimam ou se a combustão e a mistura acontecem simultaneamente (sem pré-mistura). Essas duas categorias ainda podem se subdividir se o escoamento do fluido for laminar ou turbulento.

#### 3.3.2 Chama laminar sem pré-mistura

Em chama laminar sem pré-mistura (também conhecido como chama difusiva laminar), combustível e oxidante são misturados durante o processo de combustão. Alguns exemplos são velas, fogueiras, lâmpadas de óleo. Para fins de pesquisa existem duas configurações importantes chama laminar sem pré-mistura de contracorrente e laminar de corrente paralela.

Chamas sem pré-mistura tem aspectos químicos mais complexos do que chamas com pré-mistura por causa da razão de equivalência  $\phi$  que cobre todos os valores de 0 (ar) até  $\infty$  (combustível puro). A razão de equivalência pode ser escrita segundo Dias (2011) como:

$$\phi = \frac{\left(\frac{A}{F}\right)_{esteq}}{\left(\frac{A}{F}\right)} = \frac{\left(\frac{F}{A}\right)}{\left(\frac{F}{A}\right)_{esteq}} \quad (3.10)$$

A combustão rica ocorre no lado do combustível e combustão pobre no lado do ar. A frente de chama, que é normalmente caracterizada pela intensidade luminosa, é fixa para regiões próximas de onde há composição estequiométrica  $\phi = 1$ , onde é o local que a temperatura é a máxima. Além disso, diferente da chama

pré-misturada, a chama sem pré-mistura não se propaga e por isso não pode ser caracterizada pela velocidade laminar da chama.

### **3.3.3 Chama turbulenta sem pré-mistura**

Nesse caso a chama queima em um campo de escoamento turbulento. Para turbulência de baixa intensidade o conceito de "*Flamelet*" pode ser usado. Por causa de considerações de segurança, chamas desse tipo não são usadas em fornos industriais e câmaras. A menos que técnicas muito sofisticadas de mistura sejam usadas. Chamas sem pré-mistura mostram luminosidade amarelada, causada pelo brilho da fuligem formada pela reação química do combustível rico nos domínios da chama.

### **3.3.4 Chama laminar híbrida sem pré-mistura**

Aquecimentos de casa e de água são geralmente feitos utilizando esse tipo. A mistura de combustível e oxigênio é levemente rica,  $\phi = 1,4$ , para que a fuligem seja suprimida. Os produtos subsequentemente queimam na chama sem pré-mistura rodeada por ar. Existem muitos fornos em serviço, chegando a 30% do consumo de gás natural.

## **3.4 CARACTERÍSTICAS VISÍVEIS DA CHAMA**

Chamas de hidrocarbonetos são caracterizadas pela radiação visível. Segundo Turns (2013) com um excesso de ar, a zona de reação rápida aparece azul, geralmente para chamas pré-misturadas e chamas difusivas radiam de um amarelo claro (por causa de partículas de cinzas) Peters (1992). Essa radiação resulta da excitação dos radicais CH na zona de alta temperatura. Quando o ar diminui para menos que a proporção estequiométrica, a zona torna-se agora azul-verde, como resultado da radiação resultante da excitação do  $C_2$ . Também há participação dos radicais OH para a radiação visível e em menor proporção. Se a chama continua rica, formará fuligem, com sua consequente radiação de corpo negro. Apesar de a maior parte da radiação da fuligem ter sua máxima intensidade na faixa infravermelha, a sensibilidade espectral do olho humano faz com que seja

visto amarelo claro (quase branco) até uma emissão alaranjada clara, dependendo da temperatura da chama. Chamas difusivas alongadas, na verdade, também são azuis, pois o tempo é muito rápido para partículas de cinzas serem formadas. Isso leva a conclusão que a cor da chama sofre mais influência do tempo de reação do que a sua forma de mistura (Peters, 1992).

Como foi exposto por Dias (2011), chamas com pré-mistura geralmente apresentam chamas menores e mais intensas localmente, já as chamas não pré-misturadas apresentam comprimento e volume maiores e também temperatura mais elevada a partir das extremidades para o centro da chama.

## 4. METODOLOGIA NÚMERICA

### 4.1. MODELAGEM DO ESCOAMENTO LAMINAR

As equações de conservação apresentadas a seguir são as governantes do escoamento laminar, como descrito por Versteeg e Malalasekera (2007) e Mossi (2011).

- Equação da continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4.1)$$

a massa específica no escoamento é variável e dependem da pressão, temperatura e concentração dos componentes.

- Equação de conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) \quad (4.2)$$

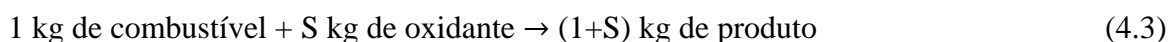
Onde  $\mathbf{u}$  é o vetor velocidade e  $p$  é a pressão. A densidade e viscosidade da mistura está representada como  $\rho$  e  $\mu$ . O termo  $\rho \mathbf{g}$  é o empuxo (força presente em um fluido causada pela variação de densidade na presença de um campo gravitacional).

## 4.2 MODELO DE TAXA QUÍMICA INFINITA (MODELO FOLHA DE CHAMA)

Para a resolução de um problema de difusão laminar é necessária a solução de todas as equações governantes em duas dimensões. No modelo de taxa química infinita a química será tratada seguindo os passos do modelo de folha de chama. Isso se justifica devido aos fatos que os mecanismos de reação detalhados com um extenso número de espécies que requerem um grande número de equações para serem resolvidas para cada espécie, onde o modelo de folha de chama acrescenta só um campo aos campos hidrodinâmicos que descrevem o escoamento subjacente e alivia o processamento computacional. A solução obtida por esse modelo pode ser aplicada como estimativa inicial para sistemas de reações multidimensionais nas quais modelos químicos detalhados são usados (Tarhan e Selçuk, 2003).

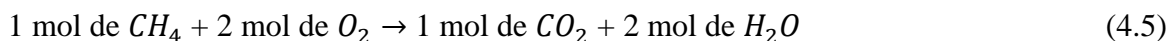
### 4.2.1 O Sistema de Reação Química Simples

Se a preocupação for com a natureza global do processo de combustão e com a concentração final das partículas, a cinemática é irrelevante para o passo global da reação química, o que o torna muito prático, e pode ser utilizada onde o oxidante combina com o combustível em proporção estequiométrica para formar os produtos.



isso corresponde a máxima "misturou = queimou" Warnatz (2006).

Para combustão do Metano:



A proporção estequiométrica oxigênio/combustível da massa S é igual a  $\frac{64}{16} = 4$  para combustão de metano, entretanto a equação acima mostra que a taxa de consumo de combustível durante a combustão estequiométrica é  $\frac{1}{5}$  vezes o consumo de oxigênio.

$$\dot{\omega}_{comb} = \frac{1}{S} \dot{\omega}_{ox} \quad (4.7)$$

No sistema de reação simples as reações químicas, infinitamente rápidas, são assumidas e as reações médias são ignoradas. As equações de transporte para o combustível e a fração de massa ( $\dot{\omega}_{oxigênio}$ ) de oxigênio são:

$$\frac{\partial(\rho y_{metano})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho y_{metano} u) = \nabla \cdot (\Gamma_{metano} \nabla y_{metano}) + \dot{\omega}_{metano} \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial \rho y_{oxigênio}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho y_{oxigênio} u) = \nabla \cdot (\Gamma_{oxigênio} \nabla y_{oxigênio}) + \dot{\omega}_{oxigênio} \quad (4.9)$$

onde  $\Gamma_{metano} = \rho D_{metano}$  e  $\Gamma_{oxigênio} = \rho D_{oxigênio}$

O fluxo de oxidante vai ter nitrogênio, que fica inalterável durante a combustão simples. A fração de componentes inertes ( $y_{inerte}$ ) permanece o mesmo antes e depois da combustão. Valores locais de  $y_{inerte}$  são determinados unicamente pela mistura, desde que os componentes inertes não participem da combustão (menos a formação de  $NO$  é considerada). Desde que a fração de massa pelo produto seja

$$y_{pr} = 1 - (y_{comb} + y_{ox} + y_{inerte}) \quad (4.10)$$

é desnecessário resolver a equação separada para  $y_{pr}$ .

É possível reduzir o número de equações de transporte mesmo depois de introduzir as variáveis:

$$\theta = S y_{comb} - y_{ox} \quad (4.11)$$

Aplicando o coeficiente de única difusão, número de Lewis unitário,  $\Gamma_{comb} = \Gamma_{ox} = \rho D = \Gamma_{\theta}$ , permite subtrair a equação

$$\frac{\partial \rho y_{ox}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho y_{ox} u) = \nabla \cdot (\Gamma_{ox} \nabla y_{ox}) + \dot{\omega}_{ox} \quad (4.12)$$

da S vezes a equação

$$\frac{\partial(\rho y_{metano})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho y_{metano} u) = \nabla \cdot (\Gamma_{metano} \nabla y_{metano}) + \dot{\omega}_{metano} \quad (4.13)$$

e combinando o resultado em uma única equação de transporte para  $\theta$



$$\frac{\partial(\rho\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\theta u) = \nabla \cdot (\Gamma_\theta \nabla \theta) + s(\dot{\omega}_{\text{metano}} - \dot{\omega}_{\text{oxigenio}}) \quad (4.14)$$

Para o passo único de reação, assumindo a equação (4.14):

$$\text{tem-se } \dot{\omega}_{\text{metano}} = \frac{1}{s} \dot{\omega}_{\text{oxigenio}} \text{ sendo } s\dot{\omega}_{\text{metano}} - \dot{\omega}_{\text{oxigenio}} = 0$$

e a equação reduz-se para

$$\frac{\partial(\rho\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\theta u) = \nabla \cdot (\Gamma_\theta \nabla \theta) \quad (4.15)$$

Portanto  $\theta$  é um escalar passivo e obedece à equação escalar de transporte sem termos de fonte. A variável adimensional  $f$  chamada fração de mistura, pode ser definida em função de  $\theta$ :

$$f = \frac{\theta - \theta_0}{\theta_1 - \theta_0} \quad (4.16)$$

Onde o sufixo 0 denota a corrente de oxidante e 1 denota a corrente de combustível. O valor de  $f$  igual a 0 da mistura no ponto contem só oxidante e igual a 1 só tem combustível.

A equação expandida é:

$$f = \frac{[sy_{\text{metano}} - y_{\text{oxigênio}}] - [sy_{\text{metano}} - y_{\text{metano}} - y_{\text{oxigênio}}]_0}{[sy_{\text{metano}} - y_{\text{oxigênio}}]_1 - [sy_{\text{metano}} - y_{\text{oxigênio}}]_0} \quad (4.17)$$

se a corrente de combustível for unicamente de combustível

$$[y_{\text{metano}}]_0 = 1 [y_{\text{oxigênio}}]_1 = 0 \quad (4.18)$$

e se a corrente de oxidante contiver combustível

$$[y_{\text{oxigênio}}]_0 = 0 [y_{\text{oxigênio}}]_1 = 0 \quad (4.19)$$

Nessas condições a equação pode ser simplificada

$$f = \frac{[sy_{\text{metano}} - y_{\text{oxigênio}}] - [-y_{\text{oxigênio}}]_0}{[sy_{\text{metano}}]_1 - [-y_{\text{oxigênio}}]_0} = \frac{sy_{\text{metano}} - y_{\text{oxigênio}} + y_{\text{oxigênio},0}}{sy_{\text{metano},1} + y_{\text{oxigênio},0}} \quad (4.20)$$

Em uma mistura estequiométrica nem o oxigênio nem o combustível estão presentes no produto, e a fração de mistura estequiométrica  $f_{est}$  pode ser definida como:

$$f_{est} = \frac{y_{oxigenio,0}}{sy_{metano,1} + y_{oxigenio,0}} \quad (4.21)$$

Química rápida implica que em certa localização com mistura pobre, existirá excesso local de oxidante e a inexistência de combustível presente no produto. Portanto  $y_{metano} = 0$  se  $y_{oxigenio} > 0$ , então:

e  $f < f_{est}$  logo

$$f = \frac{-y_{oxigenio} + y_{oxigenio,0}}{sy_{metano,1} + y_{oxigenio,0}} \quad (4.22)$$

Inversamente, em uma mistura rica existe excesso local de combustível na mistura e a inexistência de oxidante no produto. Portanto  $y_{oxigenio} = 0$  se  $y_{metano} > 0$ , então:

$f > f_{est}$ , logo

$$f = \frac{sy_{metano} - y_{oxigenio} + y_{oxigenio,0}}{sy_{metano,1} + y_{oxigenio,0}} \quad (4.23)$$

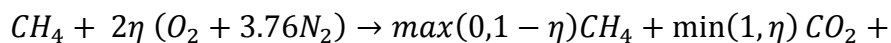
pode-se dizer que a fração de massa de combustível  $y_{metano}$  e de oxigênio  $y_{oxigenio}$  são lineares relacionadas a fração de mistura  $f$ , devido a equação (4.23) e a fração molar das espécies Warnatz (2006).

Pela equação (4.24) é perceptível que  $f$  é diretamente relacionada a  $\theta$  para a fração de mistura e também é escalar passivo obedecendo a equação de transporte

$$\frac{\partial(\rho f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u f) = \nabla \cdot (\rho D \nabla f) \quad (4.24)$$

#### 4.2.1.1 Cálculo da fração de massa e temperatura em função da fração de mistura.

A fração de massa de espécies químicas, de acordo com Zeng e Chow (2011), pode ser calculada a partir da seguinte equação irreversível de passo único:



$$2 \min(1, \eta) H_2O + 2 \max(0, \eta - 1) O_2 + 7.52\eta N_2 \quad (4.25)$$

De forma explícita as frações de massa das espécies químicas podem ser calculadas pelas seguintes equações:

$$Y_{CH_4} = \max(0, 1 - \eta) \frac{W_{CH_4}}{W_{total}} \quad (4.26)$$

$$Y_{CO_2} = \min(1, \eta) \frac{W_{CO_2}}{W_{total}} \quad (4.27)$$

$$Y_{H_2O} = 2\min(1, \eta) \frac{W_{H_2O}}{W_{total}} \quad (4.28)$$

$$Y_{O_2} = 2\max(1, \eta - 1) \frac{W_{O_2}}{W_{total}} \quad (4.29)$$

$$Y_{N_2} = 7,52\eta \frac{W_{N_2}}{W_{total}} \quad (4.30)$$

O peso total molecular ( $W_{total}$ ) é uma função da composição local e é calculada das concentrações dos reagentes

$$W_{total} = W_{CH_4} + 2\eta(W_{CO_2} + 3,76W_{N_2}) \quad (4.31)$$

e  $\eta$  (parâmetro que varia de 0 a 1 dependendo da concentração de combustível e oxidante), é representado como:

$$\eta = \frac{1-f}{f} \frac{W_{CH_4}}{2(W_{O_2} + 3,76W_{N_2})} = \frac{1-f}{f} \left(\frac{F}{A}\right)_{esteq} \quad (4.32)$$

E por sua vez  $\left(\frac{F}{A}\right)_{esteq}$  é a razão estequiométrica entre a massa de combustível e a massa de ar, ou seja, quando há quantidade suficiente de oxidante para queimar o combustível completamente (Turns, 2013).

A presença de nitrogênio visível na reação química reduz a temperatura da chama e, conseqüentemente, a temperatura dos gases resultantes da combustão, pois absorve o calor liberado pela reação para elevar sua temperatura. Em processos sem a presença de nitrogênio, a temperatura da chama pode ultrapassar muito os 2000°C, temperatura capaz de derreter as paredes da câmara de combustão dependendo do material de sua composição. A desvantagem da presença do nitrogênio é que a altas temperaturas ele se dissocia e associa-se com o radical oxigênio livre formando NO, por sua vez que reage com oxigênio do ar formando ozônio, que é um poluente.

Um ponto importante a se destacar, descrito por Barreto *et al.* (2010), é que em processos de combustão na presença de oxigênio puro só se justificam para plantas de grandes potências devido ao alto custo de separação do oxigênio e ar do nitrogênio.

Para determinação da temperatura em função de fração de mistura  $f$ , Turns (2013) explica a necessidade do uso da equação de estado calorífica. Para tal adotam-se as seguintes considerações: O calor específico de cada espécie (combustível, oxidante e produtos) são constantes e iguais  $C_{p,comb} = C_{p,oxid} = C_{p,prod} \equiv C_p$

Com isso, a equação de estado calorífica é simplificada como:

$$h = \sum Y_i h_i = Y_{comb} \Delta h_c + C_p (T - T_{ref}) \quad (4.33)$$

Para prover uma similaridade entre as equações da entalpia e fração de mistura, deve-se então escrever uma entalpia adimensional da forma a seguir:

$$h^* = \frac{Y_{comb} \Delta h_c + C_p (T - T_{oxid,\infty})}{\Delta h_c + C_p (T_{comb,e} - T_{oxid,\infty})} \equiv f \quad (4.34)$$

onde as definições abaixo também foram substituídas

$$h_{oxid,\infty} \equiv C_p (T - T_{ref}) \quad (4.35)$$

$$h_{comb,\infty} \equiv \Delta h_c + C_p (T_{comb,e} - T_{ref}) \quad (4.36)$$

Reorganizando a equação para  $T = T(f)$

$$T = (f - Y_{comb}) \frac{\Delta h_c}{C_p} + f (T_{comb,e} - T_{oxid,\infty}) + T_{oxid,\infty} \quad (4.37)$$

Usando a relação definida para as três áreas existentes na chama, obtém-se:

T dentro da chama ( $f_{esteq} < f \leq 1$ )

$$T = T(f) = f \left[ (T_{comb,e} - T_{oxid,\infty}) - \frac{f_{esteq}}{(1-f_{esteq})} \frac{\Delta h_c}{C_p} \right] + T_{oxid,\infty} + \frac{f_{esteq}}{(1-f_{esteq})} \frac{\Delta h_c}{C_p} \quad (4.38)$$

T na chama ( $f_{esteq} = f$ )

$$T = T(f) = f_{esteq} \left( \frac{\Delta h_c}{C_p} + T_{comb,e} - T_{oxid,\infty} \right) + T_{oxid,\infty} \quad (4.39)$$

T fora da chama ( $0 \leq f \leq f_{\text{esteq}}$ )

$$T = T(f) = f \left( \frac{\Delta \square_c}{C_p} + T_{\text{comb},e} - T_{\text{oxid},\infty} \right) + T_{\text{oxid},\infty} \quad (4.40)$$

Com as simplificações termodinâmicas, a temperatura dentro e fora da chama depende linearmente de  $f$ , visível na Fig. (4.1).

Depois das considerações e equações apresentadas, na Fig. (4.1) são apresentadas as variações de fração de massa de espécies químicas e temperatura com a fração de mistura.

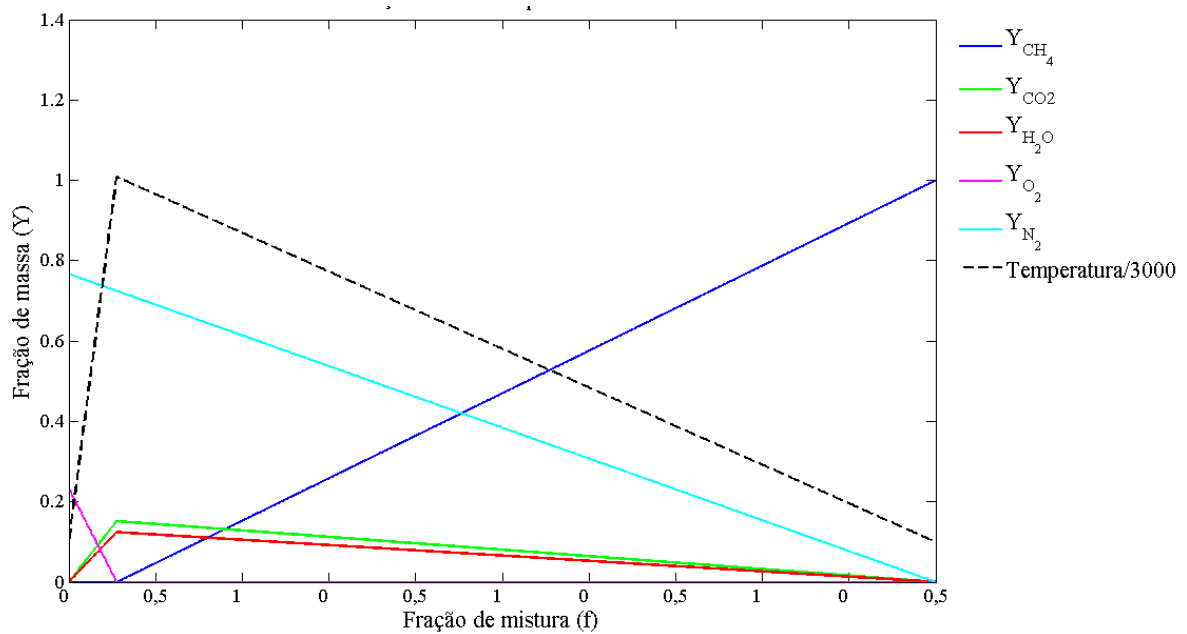


Figura 4.1 – Fração de massa das espécies químicas e temperatura.

### 4.3 MODELO DE TAXA FINITA

As reações de combustão são muito rápidas e a consideração de reação infinita pode ser muitas vezes exagerada e gerar imprecisão nos resultados. O modelo de taxa finita considera uma taxa de reação química finita. Pode ser assumido que os produtos não são formados por um único passo de reação química. A taxa, que a conexão química cria ou destrói, pode ser representada por um mecanismo de reação. No mecanismo de reação global, aproximação da combustão, geralmente assume que os reagentes são convertidos nos produtos finais por alguns poucos passos irreversíveis.

#### Determinação do campo de espécies

No modelo de taxa finita, o cálculo da evolução de cada espécie química considerada está associado à solução de uma equação de conservação:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho u Y_k) = -\nabla \cdot (J_k) + \dot{\omega}_k \quad (4.41)$$

A fração de massa é representada por  $Y_k$ . O índice  $k$  denota a espécie química específica:  $H_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ , e  $N_2$ . O termo  $\dot{\omega}_k$  caracteriza a taxa líquida de produção da espécie  $k$  pelas reações homogêneas. Essas taxas de reações devem ser obtidas do mecanismo de reação. A lei de Fick será empregada na utilização do fluxo de difusão das espécies,  $J_k = -\rho D_k \nabla Y_k$ . O  $D_k$  é o termo para o coeficiente de difusão. A fim de simplificar, é assumido o Número de Lewis unitário,  $Le = \frac{\alpha}{D} = 1$ , e por isso, todo o  $D_k$  pode ser determinado como  $D = \alpha$ .

De acordo com Dryer e Glassman, que estudaram a reação de metano e oxigênio, os produtos finais da combustão são dióxido de carbono e água. Monóxido de carbono foi observado como a espécie intermediária importante responsável pela reação à baixas temperaturas, por isso este foi considerado. O mecanismo para reações homogêneas é apresentado na Tab. 4.1. As taxas constantes apresentadas foram obtidas de Westbrook e Dryer (1981).

Tabela 4.1 - Mecanismo Quasi Global para reações homogêneas.

Reação	Taxa
$CH_4 + \frac{1}{2} O_2 \xrightarrow{R_{CH_4}} CO + 2H_2$	$R_{CH_4} = -A_{CH_4} \exp(-E_{CH_4}/(R_u T_s)) [CH_4]^a [O_2]^b$
$CO + \frac{1}{2} O_2 \xrightarrow{R_{CO}} CO_2$	$R_{CO} = -A_{CO} \exp(-E_{CO}/(R_u T_s)) [CO]^a [O_2]^b [H_2O]^c$
$CO_2 \xrightarrow{R_{CO_2}} CO + \frac{1}{2} O_2$	$R_{CO_2} = -A_{CO_2} \exp(-E_{CO_2}/(R_u T_s)) [CO_2]^a$
$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \xrightarrow{R_{H_2}} H_2O$	$R_{H_2} = -A_{H_2} \exp(-E_{H_2}/(R_u T_s)) [H_2][O_2]$

Westbrook e Dryer (1981) assumiram expoente da concentração de  $CH_4$  negativo (-0,3) na taxa de  $R_{CH_4}$ . Isso demonstra que tecnicamente o combustível age como inibidor. Do ponto de vista numérico isso pode criar problemas desde que a taxa do metano de consumo aumenta sem limite a medida que a concentração de metano se aproxima a zero. Algumas soluções sugeridas foram: uma reação reversa para ser usada para prover equilíbrio na concentração do combustível para um nível pequeno, prevendo que a expressão da taxa fique muito grande ou a expressão da taxa pode ser artificialmente truncada para determinado valor. Andersen *et al.* (2008) comenta que o modelo de Westbrook e Dryer foi desenvolvido para descrever a taxa de pós ignição de combustível enquanto outros métodos são otimizados para condições da chama, mas que o modelo consegue mostrar a conversão de  $CH_4$  para  $CO_2$  na ordem de  $10^{-3}$ , o que é satisfatório.

Na reação  $R_{CO}$  a inclusão de  $H_2O$  na expressão da taxa pode ser explicada porque a maioria de  $CO$  é consumido pela reação com  $OH$  que para a primeira aproximação, pode ser assumida que está em equilíbrio com a água, como explica Flogan e Seinfeld (1988). Além disso, a fim de reproduzir apropriadamente o aquecimento da reação e a dependência da pressão do equilíbrio do  $[CO]/[CO_2]$ , na reação reversa do  $CO$ ,  $R_{CO_2}$ , o expoente  $a$  tem que ser menor que a soma dos expoentes da reação do  $R_{CO}$ , para permitir que a taxa de  $[CO]/[CO_2]$  diminua com o aumento da pressão. Resultados satisfatórios foram obtidos com  $a = 1$  e fator pré-exponencial  $A_{CO_2} = 5 \times 10^8$ .

### Determinação do campo de temperaturas

O campo de temperatura é obtido a partir da solução da equação de conservação de energia, dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_{p,mix}T) + \nabla \cdot (\rho c_{p,mix}uT) = \nabla \cdot (k_{mix}\nabla T) + \sum_{k=1}^{N_{esp}} \dot{\omega}_k h_k \quad (4.42)$$

Onde T é a temperatura, os termos  $c_{p,mix}$  e  $k_{mix}$  representam calor específico e condutividade termica da mistura gasosa, respectivamente. O termo  $\sum_{k=1}^{N_{esp}} \dot{\omega}_k h_k$  representa a geração de calor por meio de reações homogêneas.

#### 4.4 PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS

As propriedades termofísicas são calculadas como função da temperatura e composição da mistura. O modelo de gases ideais é utilizado para relacionar a massa específica da mistura de gases com a temperatura:

$$\rho = (p\bar{W})/(R_u T_g) \quad (4.43)$$

O peso molecular da mistura de gases  $\bar{W}$  é obtido a partir da composição dos gases da seguinte forma:

$$\bar{W} = (\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k/W_k)^{-1} \quad (4.44)$$

Onde  $Y_k$  e  $W_k$  são a fração de massa e o peso molecular de uma determinada espécie  $k$ , respectivamente.

O calor específico da mistura de gases à pressão constante pode ser obtido como:

$$c_p = \sum_{k=1}^N Y_k \bar{c}_{p,k} W_k \quad (4.45)$$

O calor específico das espécies individuais, presente na equação, é calculado em função da temperatura pela seguinte relação, onde as constantes são retiradas de (Bird *et al.*, 2002):

$$\bar{c}_{p,k} = aT_g + bT_g^2 + cT_g^3 + dT_g^4 \quad (4.46)$$



A viscosidade e a condutividade térmica da mistura de gases são calculadas com base nos componentes puros da mistura (Bird et al., 2002):

$$\mu = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k \mu_k}{\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_j \Theta_{kj}} \quad (4.47)$$

$$k = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k k_k}{\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_j \Theta_{kj}} \quad (4.48)$$

Onde  $\Theta_{kj}$  é calculada conforme Bird *et al.* (2002) como:

$$\Theta_{kj} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left( 1 + \frac{W_{g,k}}{W_{g,j}} \right)^{-\frac{1}{2}} \left[ 1 + \sqrt{\frac{\mu_i}{\mu_j}} \left( \frac{W_{g,j}}{W_{g,k}} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2 \quad (4.49)$$

Onde  $W_{g,k}$  e  $W_{g,j}$  são dados em (kg kmol<sup>-1</sup>) e representam o peso molecular da espécie gasosa k e o peso atômico do elemento sólido.

#### 4.5. CASO TESTE

O sistema de combustão será a câmara cilíndrica de chama difusiva de Mitchell *et al.* (1980), que consiste em dois cilindros concêntricos de raio externo e raio interno iguais a  $R_e = 2,54$  cm e  $R_i = 0,635$  cm, por onde passam o ar e o combustível, respectivamente, Fig. (4.2) a (4.3). O comprimento da câmara Z, é de 30 cm. As taxas de escoamento foram selecionadas para que o mesmo seja uma chama difusiva uniforme. Um vidro Pyrex serve como escudo para a chama e completa as fronteiras do sistema, assim como mostrado na Fig. (4.2). Segundo Bollig *et al.* (1998) análises de escoamento de reações químicas com cinética química completa de combustão são extremamente complicadas exceto para configurações geométricas muito simples. O esquema de combustão para chama laminar é exemplificado na Fig. 4.4. Na Figura 4.5 é apresentada a geometria simplificada assumida no presente trabalho.

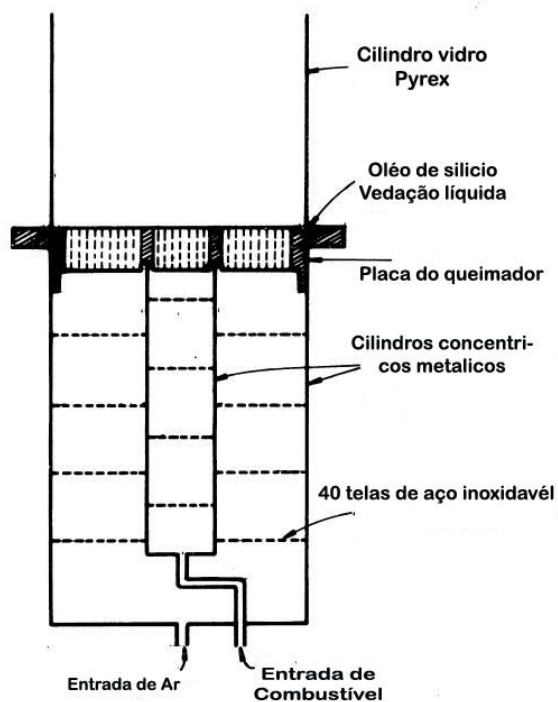


Figura 4.2 - Vista esquemática da câmara de combustão do laboratório, destacando os cilindros concêntricos (Mitchell *et al.* 1975).

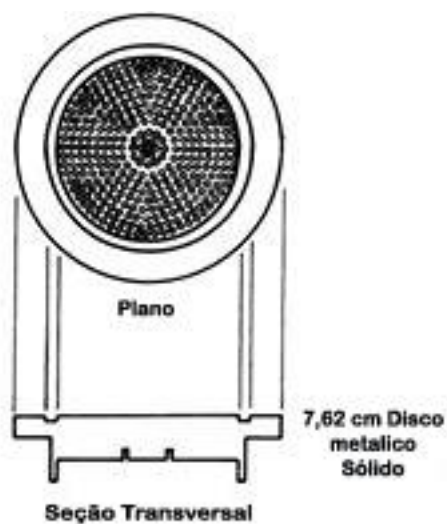


Figura 4.3 - Vista esquemática da placa de injeção de combustível e oxidante do combustor (Mitchell *et al.* 1975).

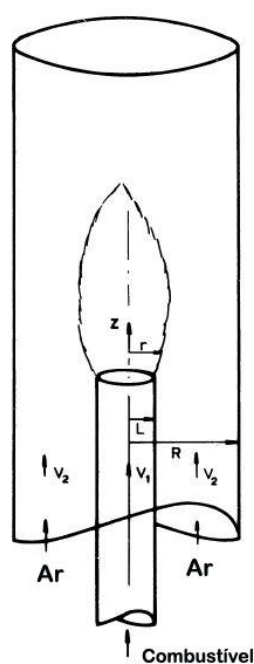


Figura 4.4 – Esquema chama laminar difusa na câmara de combustão. (Mitchell *et al.* 1975).

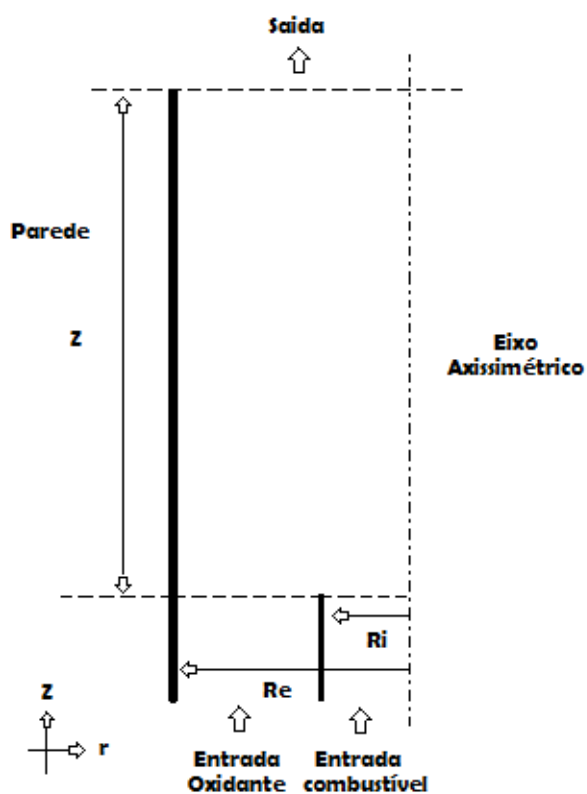


Figura 4.5 – Geometria simplificada bidimensional axissimétrica da câmara de combustão utilizada nas simulações.

#### 4.6 CONDIÇÕES DE CONTORNO E INICIAIS

As condições de contorno e iniciais adotadas são as mesmas consideradas por Tarhan e Selçuk (2003), apresentadas na Tab. (4.2). Os valores de velocidade e temperatura nos contornos de entrada são explicitados na Tab. (4.3). Valores de referência, como os de temperatura e pressão, foram adotados como os do estado de referência (Turns, 2013), que são consistentes com a base de dados termodinâmicos.

De acordo com a Tab. (4.2) a condição inicial, CI, representa o sistema ainda sem interação alguma, ou seja, combustível e o oxidante não possuem velocidade e consequentemente não possui fração de mistura. Para a parede (CC2), que corresponde à parede externa do cilindro, todos os valores terão valores iguais a zero. Isso ocorre, pois todo o desenvolvimento da chama acontece no eixo e a parede só serve como extremidade para limitar a área de ocorrência do escoamento.

Tabela 4.2 - Condições de contorno, CC e condições iniciais, CI.

CI	$t = 0$	$\forall z \forall r$	$u = 0$	$v = 0$	$f = 0$
CC 1	Eixo	$\forall z \forall r$	$\frac{\partial u}{\partial r} = 0$	$v = 0$	$\frac{\partial f}{\partial r} = 0$
CC 2	Parede	$\forall z \forall r$	$u = 0$	$v = 0$	$f = 0$
CC 3	Entrada	$\forall z \forall r$	$u = u_e$	$v = 0$	$f = f_e$
CC 4	Saída	$\forall z \forall r$	$\frac{\partial u}{\partial Z} = 0$	$\frac{\partial v}{\partial Z} = 0$	$\frac{\partial f}{\partial Z} = 0$
$T_{ref} = 25 \text{ }^{\circ}\text{C} = 298,15 \text{ K}$ e $P_{ref} = P^0 = 1 \text{ atm} = 101,325 \text{ Pa}$					

Tabela 4.3 - Condições de entrada.

Cilindro interno			Cilindro externo		
Vel. axial $u_{CH_4}$	Vel. radial $v_{CH_4}$	Temp.	Vel. axial $u_{O_2}$	Vel. radial $v_{O_2}$	Temp.
4,5 cm/s	0,0 cm/s	298K	9,88 cm/s	0,0 cm/s	298 K
Temperatura da parede se manterá constante $T_{parede} = 298 \text{ K}$					

O eixo (CC1), como já comentado, não possui variação de velocidade de acordo com o raio e nem a fração de mistura. A condição de entrada pode ser subdividida em 2, uma para a entrada de combustível e a outra para a do oxidante, onde os mesmos assumirão valores constantes de acordo com a Tab. (4.3) e mais uma vez a velocidade axial será 0 e por fim a fração de mistura receberá o valor de 1

para quando corresponder somente a combustível na entrada de combustível e 0 para oxidante e o inverso para a entrada de oxidante. Como última condição (CC 5) para a saída, a variação das velocidades tendem a 0 no fim da câmara assim como a fração de mistura, mostrando a total interação na combustão entre as espécies químicas.

#### 4.7 PROCESSAMENTO

No código utilizado, as equações diferenciais são resolvidas seguindo o método de volumes de controle baseado em elementos, que consiste na transformação de equações diferenciais em equações algébricas (Taylor, 2002). Um esquema implícito de primeira ordem (método de Euler) é aplicado na discretização do termo temporal, um esquema de interpolação exponencial *upwind*, conhecido como FLO, é utilizado na discretização dos termos advectivos e um esquema de interpolação linear é utilizado na discretização dos termos difusivos (Cunha, 2010). Todas as equações resultantes dos métodos de discretização são resolvidas por método de solução direta disponível no software MATLAB. As equações de conservação da massa e quantidade de movimento linear são resolvidas de forma segregada (separada e sequencialmente), de forma análoga descrito no algoritmo SIMPLE de Patankar (1980). Outro fator é a utilização de precisão dupla. Todos esses atributos fazem parte de uma versão do código de dinâmica dos fluidos computacional desenvolvido por Cunha (2010) e aplicado nas simulações deste trabalho.

##### 4.7.1 Descrição das funções utilizadas no código

O código de simulação escrito por Cunha (2010) trabalha com entradas e saídas de dados estocados em estruturas. A estrutura é um tipo de dado que reúne dados relacionados usando recipientes de dados chamado campos. Cada campo pode conter dados de qualquer tipo ou tamanho. Por isso nas funções que serão apresentadas a seguir as entradas e saídas de dados na forma de estruturas. As variáveis estão associadas a estrutura VS. As propriedades físico-químicas e de

transporte estão associadas a estrutura PF e os parâmetros geométricos associados a estrutura PP.

Função: [VS]=ATUALIZA\_VARIAVEIS(VS);

Atualiza os valores das variáveis.

Função: [PF]= CALCULO\_PROPRIEDADES (VS);

Calcula todas as propriedades termodinâmicas e propriedades de transporte em função da temperatura e composição da mistura de gases.

Função: [VS]=SOLUCAO\_CAMPO\_ESCOAMENTO (PF,VS,PP);

Resolve simultaneamente as equações de conservação da massa e conservação da quantidade de movimento.

Função: [ $\phi$ ]=RESOLVE\_ESCALAR( $\Gamma_\phi$ ,U,V,  $\rho$ ,dt,  $S_\phi$ ,  $\phi_0$ ,N\_bc);

Resolve a equação de conservação de um escalar genérico:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V\phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + S_\phi \quad (4.50)$$

Onde U e V são as componentes do vetor velocidade,  $\rho$  é a massa específica da mistura,  $\Gamma_\phi$  é o coeficiente de difusão,  $S_\phi$  é o termo de fonte e N\_bc armazena informações das condições de contorno. E finalmente,  $\phi$  é o escalar no momento atual e  $\phi_0$  é o escalar no passo de tempo anterior, dt.

Função: [VS]=R\_ EULER(PF,VS,PP);

Resolução de um conjunto de equações diferenciais ordinárias usando o método de Euler. Cada uma com a forma:

$$\frac{d}{dt}(\rho\phi) = S_\phi \quad (4.51)$$

#### 4.7.2 Código de simulação para o modelo folha de chama

Considerando a equação (4.50), a equação da fração de mistura foi resolvida considerando  $\phi = f$ ,  $\Gamma_\phi = \rho D$ , e  $\dot{S}_\phi = 0$ . Como o número de Lewis foi considerado unitário,  $\rho D = k/c_p$ , então:  $\Gamma_\phi = k/c_p$ , e este último termo foi utilizado na equação.

##### 4.7.2.1 Esquema de solução

Em cada passo de tempo o código reproduz os seguintes passos:

Início simulação

Faça I=2:n

```
[VS]=ATUALIZA_VARIAVEIS(VS);
[PF]=CALCULO_PROPRIEDADES(VS);
[VS]=SOLUCAO_CAMPO_ESCOAMENTO(PF,VS,PP);
[f_mist]=RESOLVE_ESCALAR(k.mix/cp.mix,U,V,ro,dt,0,f0_mist,N_bc);
```

Fim faça

Fim simulação

I=1 são os valores iniciais (já apresentados). A simulação inicia em I=2 e termina quando I=n. Em cada ciclo (cada I) é avançado um passo de tempo ( $\Delta t$ ).

Com base na fração de mistura as frações de massa de espécies químicas e a temperatura foram obtidas das relações já discutidas.

#### 4.7.3 Código de simulação para o modelo de taxa química finita

O código numérico de solução utiliza a técnica de divisão de operações para resolver o problema de combustão. O problema original é dividido em dois passos fracionados sequenciais. Um passo fracionado associado à reação química e um passo fracionário devido à advecção-difusão. Em cada passo fracionado uma técnica numérica diferente é utilizada. Uma rotina, baseada no método de Euler explícito, é utilizada para resolver o passo de reação química e a rotina “RESOLVE\_ESCALAR” é empregada na solução do passo de advecção-difusão. De modo geral:

$$\phi_{adv-difusão,t0}^{reação\ t0} \xrightarrow{reação} \phi_{adv-difusão,t0}^{reação\ t0+\Delta t} \xrightarrow{adv-difusão} \phi_{adv-difusão,t0+\Delta t}^{reação\ t0+\Delta t}$$

A simulação segue basicamente os seguintes passos descritos a seguir:

Ajuste dos valores iniciais, seguido do campo inicial de espécies. Como exemplo, o campo inicial de fração molar de  $O_2$  será ajustado igual 0,21 e o campo inicial de fração molar de  $N_2$  será ajustado igual ao complemento de 0,21 até 1, ou seja, 0,79. Todos os demais campos serão nulos. Definição do campo inicial de temperaturas e definição do campo inicial de velocidades. Os gradientes de pressão serão nulos no instante inicial.

#### 4.7.3.1 Esquema de solução

Em cada passo de tempo o código reproduz os seguintes passos:

Início simulação

Faça I=2:n

```
[VS]=ATUALIZA_VARIAVEIS(VS);
[PF]=CALCULO_PROPRIEDADES(VS);
[VS]=SOLUCAO_CAMPO_ESCOAMENTO(PF,VS,PP);
[y_CH4]=RESOLVE_ESCALAR(k.mix/cp.mix,U,V,ro,dt,0,Y0_CH4,N_bc);
[Y_O2]=RESOLVE_ESCALAR(k.mix/cp.mix,U,V,ro,dt,0,Y0_O2,N_bc);
[Y_CO]=RESOLVE_ESCALAR(k.mix/cp.mix,U,V,ro,dt,0,Y0_CO,N_bc);
[Y_H2O]=RESOLVE_ESCALAR(k.mix/cp.mix,U,V,ro,dt,0,Y0_H2O,N_bc);
[Y_CO2]=RESOLVE_ESCALAR(k.mix/cp.mix,U,V,ro,dt,0,Y0_CO2,N_bc);
[Y_H2]=RESOLVE_ESCALAR(k.mix/cp.mix,U,V,ro,dt,0,Y0_H2,N_bc);
[Y_N2]=1-(Y_O2+Y_CH4+Y_CO+Y_H2O+Y_CO2+Y_H2);
[Temp]=RESOLVE_ESCALAR(k.mix/cp.mix,U,V,ro,dt,0,Temp0,N_bc);
[VS]=R_EULER(PF,VS,PP);
```

Fim faça

Fim simulação

I=1 são os valores iniciais (já apresentados). A simulação inicia em I=2 e termina quando I=n. Em cada ciclo (cada I) é avançado um passo de tempo ( $\Delta t$ ).



## 5.0 RESULTADOS

### 5.1 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DE MALHA

Na metodologia utilizada no presente trabalho a malha de elementos finitos tem por objetivo dividir um determinado domínio de interesse em subdomínios. O que rende um conjunto de nós (pontos com coordenadas) e elementos finitos triangulares. A malha de volumes finitos é obtida a partir da malha de volumes finitos e é utilizada para integração das equações diferenciais. De acordo com o nível de refinamento é possível obter resultados mais precisos e melhores, porém o tempo computacional sempre deve ser considerado para obtenção dos mesmos.

O objetivo do teste de sensibilidade da malha é investigar a independência dos resultados em função do refinamento da malha. O presente trabalho só focará no caso de combustão em regime permanente, por isso só o teste de independência de malha espacial será realizado.

#### 5.1.1 Independência de malha espacial

As geometrias e as malhas do caso foram geradas no software Gambit 2.4.6, cujo os parâmetros podem ser visualizados na Tab. (5.1). O computador utilizado para realização do mesmo, possui processador Intel®Core™ i7-3630QM 2.4GHz com Turbo *Boost* acima de 3.4 GHz, 8 GB DDR3 de memória RAM e sistema operacional Windows 8. O programa para simulação, o qual foi adaptado o código de dinâmica dos fluidos computacional desenvolvido por Cunha (2010), foi simulado no MATLAB versão 7.6.0.324, R2008a.

Tabela 5.1 - Parâmetros das malhas utilizadas na simulação.

Malha	Descrição	Nº de nós	Nº de Elementos
1	Grossa	6161	12000
2	Média	12236	24000
3	Fina	24257	47880

A seguir é apresentada a malha média em sua totalidade, Fig. (4.6). Na Figura (4.7) é possível ver em destaque as entradas de combustível e de oxidante

(lado esquerdo correspondente ao fundo do cilindro). Nessa região, onde ocorrerá a mistura dos reagentes a malha foi refinada a fim de conseguir uma melhor aproximação dos altos gradientes, como também descrito por Tarhan e Selçuk (2003). Desta forma a malha foi refinada e à medida que se afasta do centro de interação, o espaçamento aumenta (nos dois eixos), já que todo o fenômeno ocorre em paralelo ao eixo de simetria. Abordagem semelhante foi aplicada tanto à malha mais grossa quanto a mais fina.

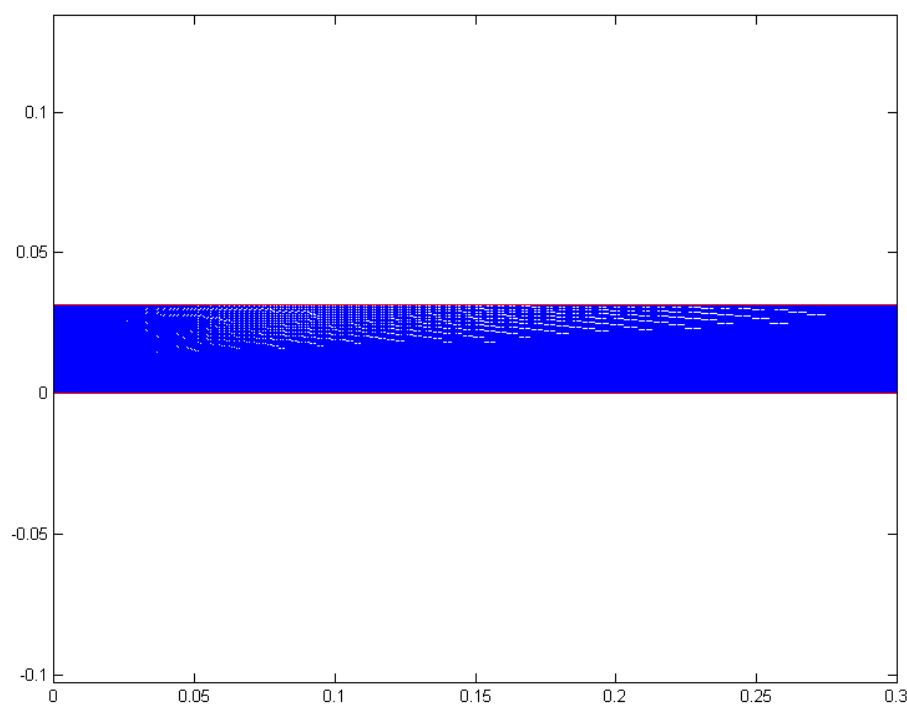


Figura 4.6 - Malha 2: Média.

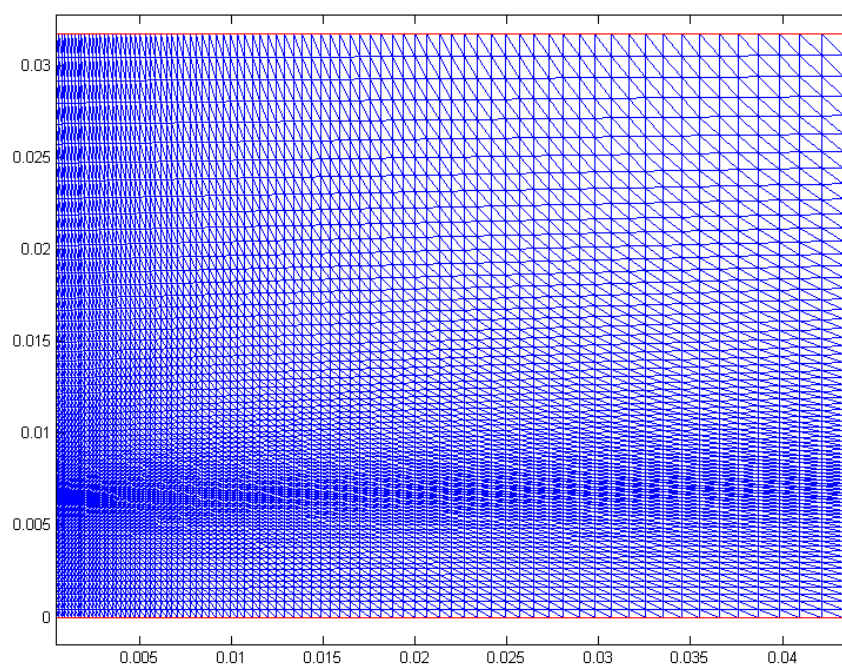


Figura 4.7 - Malha 2: Média (aproximação da entrada de combustível e oxidante).

Para fazer análise do impacto do refinamento da malha nos resultados, são apresentados oito gráficos utilizando o método folha de chama, Fig. (4.8) a (4.10). A partir dos resultados das três malhas sobrepostos é possível verificar se os resultados convergem ou divergem com o refinamento da malha.

Nas Figuras (4.8a), (4.9a) e (4.10a) apresenta-se as curvas de Temperatura para a variação do raio da câmara de combustão de  $r$ , sendo cada curva representada por uma malha. Observa-se que a malha mais grossa destoa das outras duas e os resultados associados às malhas média e fina praticamente se sobrepõem. O refinamento mostra que há melhor precisão nos resultados, mas a malha média já apresenta bons resultados.

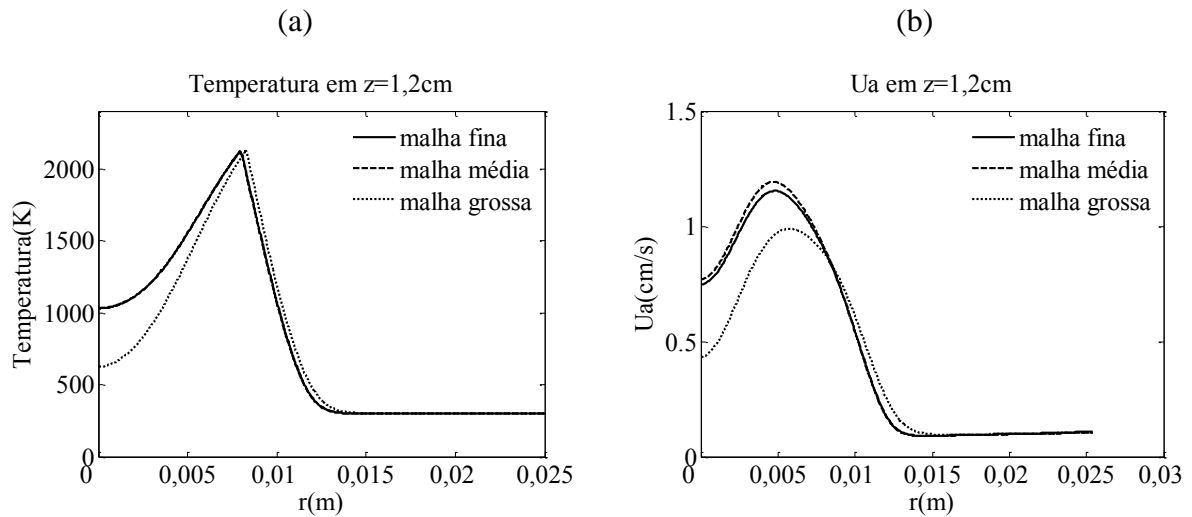


Figura 4.8 – (a) Temperatura e (b) Componente axial de velocidade no comprimento  $Z=1,2$  cm - teste espacial de malha.

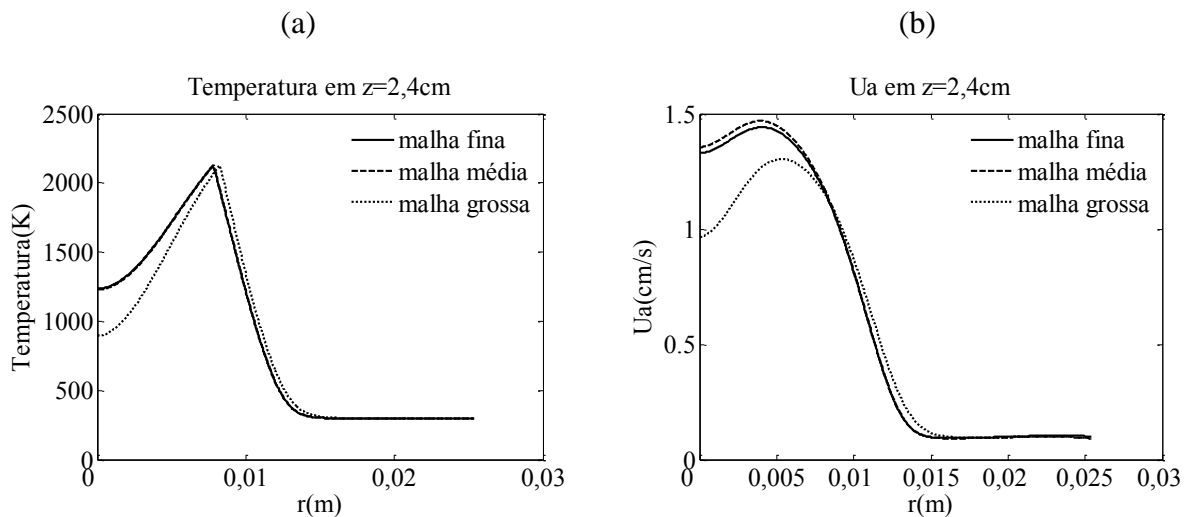


Figura 4.9 – (a) Temperatura e (b) Componente axial de velocidade no comprimento  $Z=2,4$  cm - teste espacial de malha.

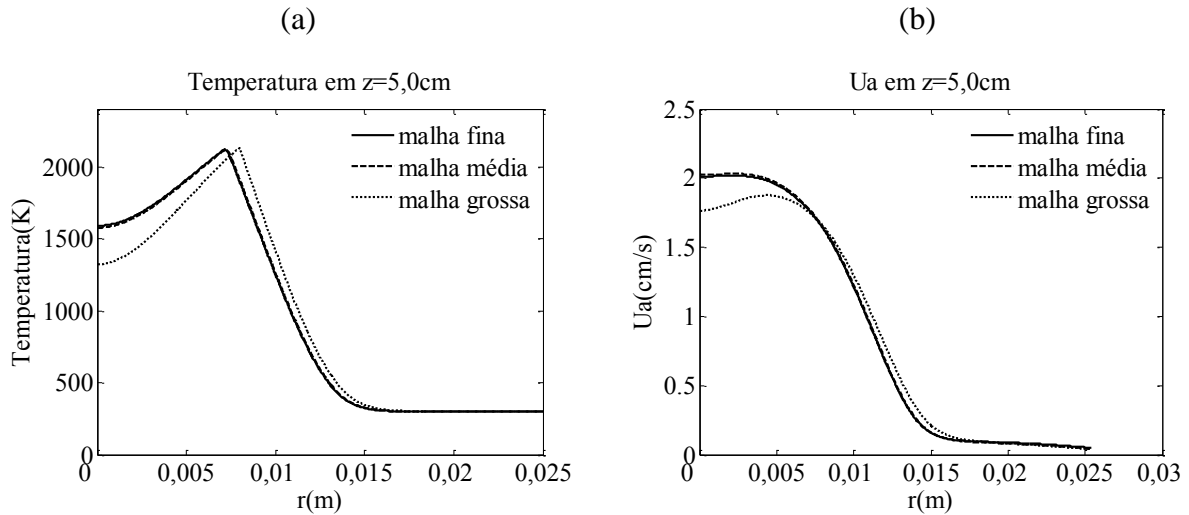


Figura 4.10 – (a) Temperatura e (b) Componente axial de velocidade no comprimento  $Z=5,0$  cm - teste espacial de malha.

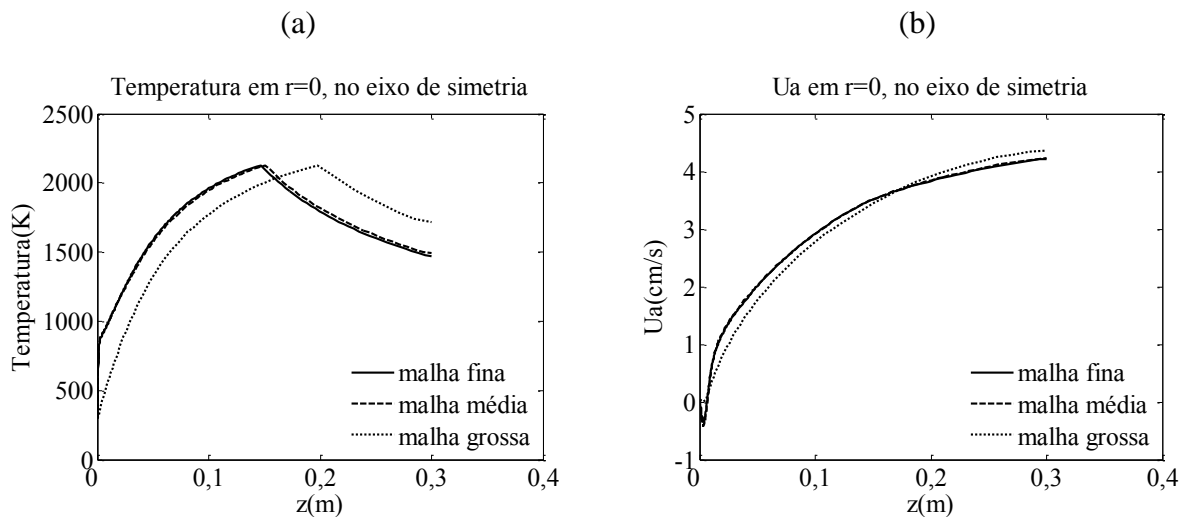


Figura 4.11 – (a) Temperatura e (b) Componente axial de velocidade eixo de simetria - teste espacial de malha.

Na Figura (4.11a), que é a variação da temperatura no eixo de axissimetria, a análise é similar a anterior, mas observa-se uma diferença sutil entre a malha média e a malha fina após o  $z = 0,15$  m, entretanto ainda mostra-se uma boa concordância entre os valores.

Nas Figuras (4.8b), (4.9b) e (4.10b) apresenta-se as curvas de velocidade axial variando com o tamanho do raio da câmara de combustão. Nota-se que a malha grossa apresenta resultados bem divergentes, até o valor aproximado de 0,01 do raio, em relação às outras duas malhas. Após esse valor as malhas média e fina

apresentam resultados muito próximos e, até mesmo a malha grossa, apresenta resultado que converge com os observados nas duas malhas refinadas.

Na Figura (4.11b), variação da velocidade axial no eixo de simetria, as três malhas apresentam resultados próximos durante toda a análise, sendo que a malha grossa diverge em alguns trechos em relação as outras duas malhas mais refinadas.

Na Figura (4.12) é possível comparar o tempo gasto para processar as malhas em função do número de nós e elementos. Pode-se inferir que quanto maior o número de nós, o tempo aumenta de forma expressiva.

O fator tempo é um parâmetro importante, sendo ele uma das principais considerações para escolha de uma das malhas.

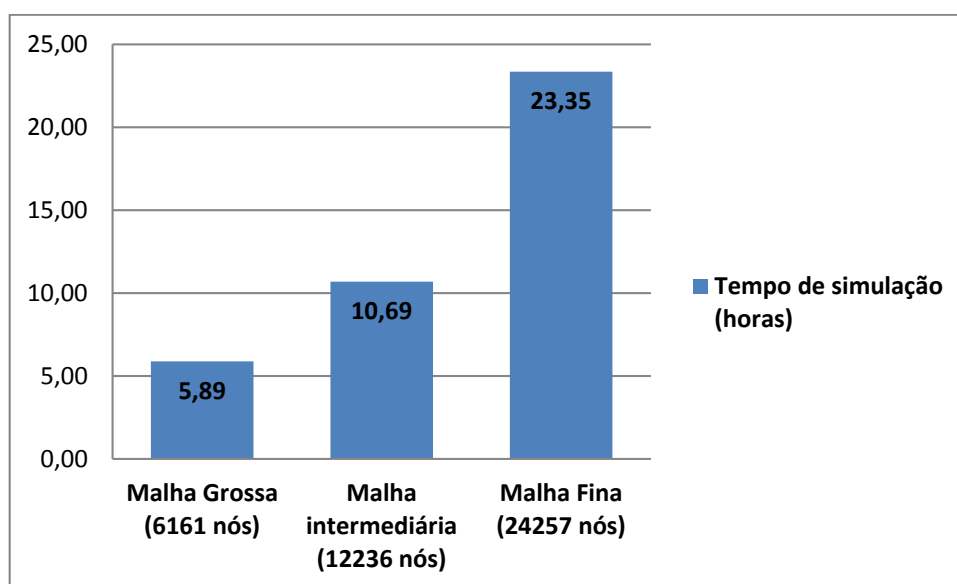


Figura 4.12 - Tempo gasto pela CPU para simulação.

Diante do exposto, optou-se escolher a malha média para análise, já que apresentou melhores resultados em relação a malha grossa e resultados próximos da malha fina e possui o tempo computacional menor que a metade da malha fina, o que prova ser a mais vantajosa para abordagem neste trabalho.

## 5.2 ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Os resultados obtidos através de simulação serão apresentados e comparados aos dados experimentais de Mitchell *et al.* (1980). Com as comparações pretende-se verificar a precisão das modelagens empregadas.

O tempo de CPU gasto no Método de Folha de Chama foi de 10,69 horas, já no Método de Taxa Finita usando a mesma malha intermediária foi de 144,36 horas, ou seja, praticamente 13,5 vezes mais tempo do que o primeiro método. Segundo Westbrook e Dryer (1981), a adição de espécies intermediárias como  $CO$ ,  $H_2$  e outras juntas com outros refinamentos de mecanismo de reação de vários passos faz a temperatura e a composição mais precisa, ao custo de gastar mais tempo computacional. Ainda segundo Flogan e Seinfeld (1988), os hidrocarbonetos são rapidamente consumidos durante a combustão, formando  $CO$ ,  $H_2$  e  $H_2O$ . A oxidação de  $CO$  para  $CO_2$  acontece de alguma forma mais lenta, o que faz aumentar o tempo de simulação.

Os perfis radiais das frações molares para 3 valores fixos axiais ( $z=1.2$ ,  $2.4$  e  $5.0$ ) de  $CH_4$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $N_2$  são mostrados neste trabalho, Fig. (4.13) a (4.20) também estão presentes no trabalho de Du (2000), Sauer (2012) e Tarhan e Selçuk (2003). Vale lembrar que o modelo de folha de chama não permite avaliar os perfis das espécies químicas  $CO$ ,  $H_2$  e principalmente as de alto radical de difusão como  $H$ ,  $O$  e  $OH$  (Westbrook e Dryer, 1981).

As análises do  $CH_4$ , de acordo com os resultados de Du (2000) mostram uma grande diferença de valores entre as curvas simuladas e os valores encontrados experimentalmente, também verificável nas Fig. (4.13a), (4.14a) e (4.15a). Nota-se que os resultados estão bem distantes dos dados experimentais, principalmente para o perfil em  $z=5,0$  cm, existe uma inconsistência física, onde mostra-se a concentração decrescente, quando na verdade ela deveria ser nula ou bem próximo de zero. Tarhan e Selçuk (2003) destacam que isso ocorre devido a penetração do oxidante no lado do combustível e isso justificaria a diferença na comparação dos resultados no Modelo Folha de Chama. Sauer (2012) ainda destaca que esse resultado é devido ao modelo considerar o número de Lewis, equação (4.11), para todas as espécies químicas iguais a 1.

Os perfis de  $O_2$  mostrado nas Fig. (4.13b), (4.14b) e (4.15b) predizem a concentração da espécie química. Na Figura (4.13b), para  $z=1.2$ , percebe-se que no começo os valores da simulação é zero para o Modelo Folha de Chama, enquanto os dados experimentais não são, porém na ascendência da curva (por volta de 0,0075 m) os valores divergem e os dados experimentais não são todos regulares. Nas Figuras (4.14b) para  $z=2.4$  cm e (4.15b) para  $z=5.0$  cm os valores são diferentes, não havendo nenhuma coincidência entre dados experimentais e simulados pelo método de folha de chama. Segundo Tarhan e Selçuk (2003) e Sauer (2012), a discrepância de  $O_2$  no lado do combustível é devido a impossibilidade do oxidante penetrar no lado do mesmo pelo método folha de chama.

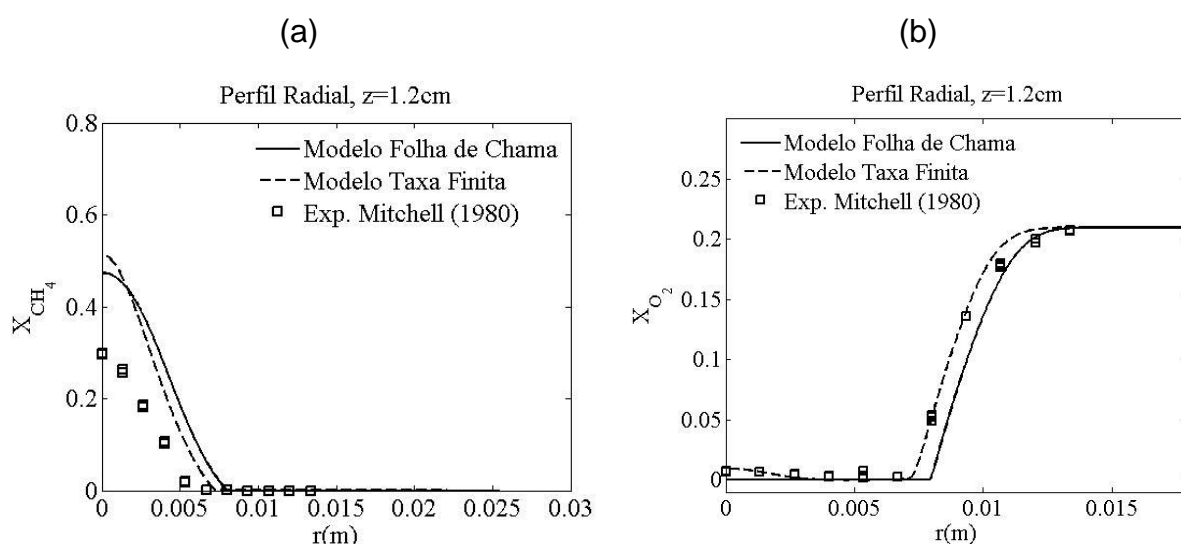


Figura 4.13 - Comparação de perfis em  $z=1,2$  cm. (a) Fração molar de  $CH_4$  (b) Fração molar de  $O_2$ . Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).



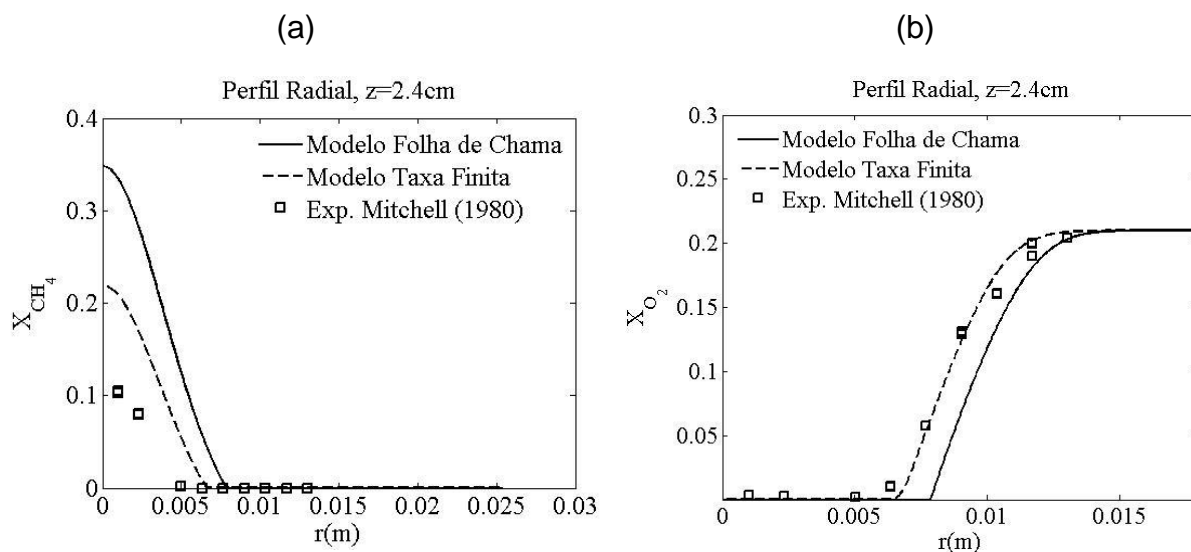


Figura 4.14 - Comparação de perfis em  $z=2,4$  cm. (a) Fração molar de  $CH_4$  (b) Fração molar de  $O_2$ . Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).

Um fator importante que pode justificar a diferença entre dados experimentais e os simulados mostrados nas Fig. (4.13b), (4.14b) e (4.15b) é a diferença de injeção dos reagentes. Na simulação o fluxo de massa é considerado perfeitamente distribuído na entrada da câmara de combustão, entretanto experimentalmente é considerada uma placa de injeção para entrada de combustível e oxidante, ou seja, a injeção acontece por múltiplos jatos (Fig. 4.2, Fig. 4.3 e Fig. 4.4). Estes jatos devem promover maior mistura do combustível e oxidante, o que deve acelerar as reações na região próxima da entrada. Esse efeito de mistura só seria considerado numa simulação tridimensional, o que não foi o caso adotado no presente trabalho.

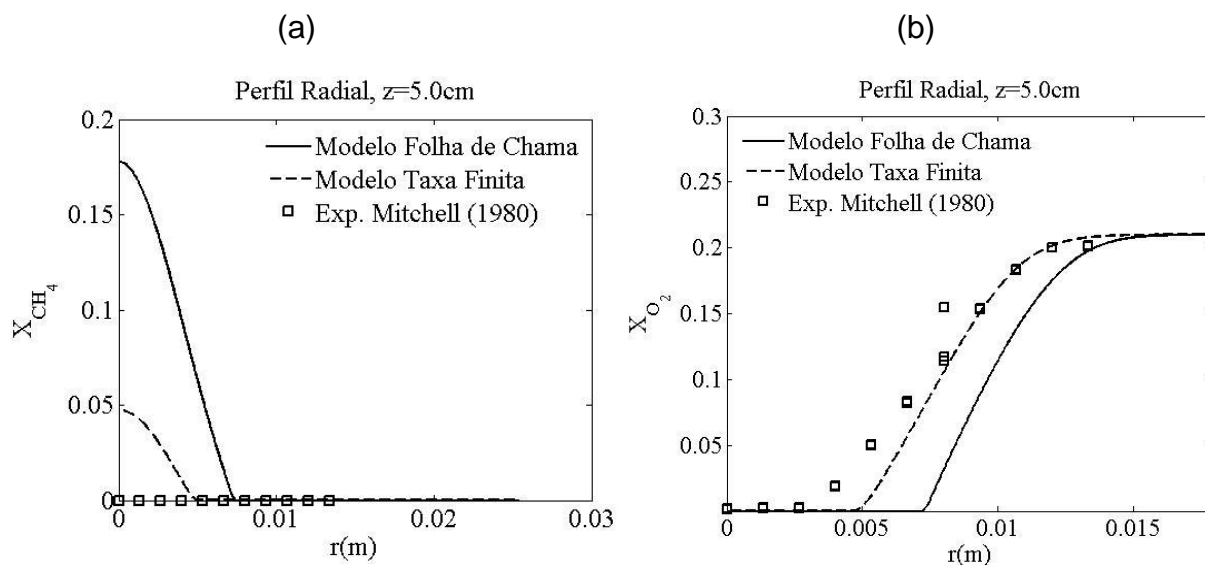


Figura 4.15 – Comparação de perfis em  $z=5,0\text{ cm}$ . (a) Fração molar de  $\text{CH}_4$  (b) Fração molar de  $\text{O}_2$ . Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).

Os perfis para o  $\text{N}_2$ , Fig. (4.16a), (4.17a) e (4.17b) concordam razoavelmente com os dados experimentais. Em geral os as frações molares experimentais são superiores na parte inicial e do meio ao fim do intervalo são coincidentes com as curvas simuladas.

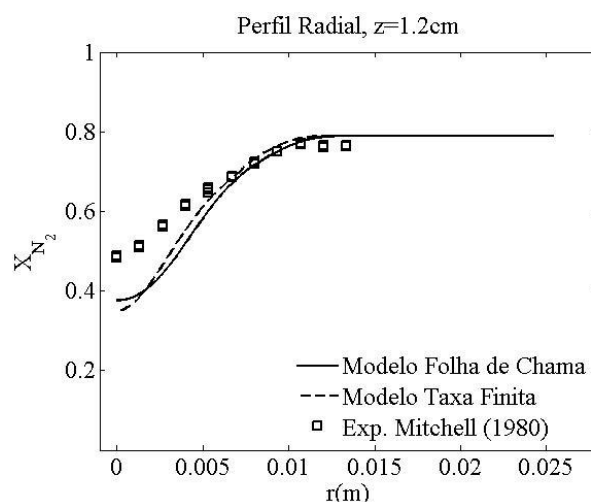


Figura 4.16 - Comparação de perfis em  $z=1,2\text{ cm}$ . (a) Fração molar de  $\text{N}_2$ . Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).

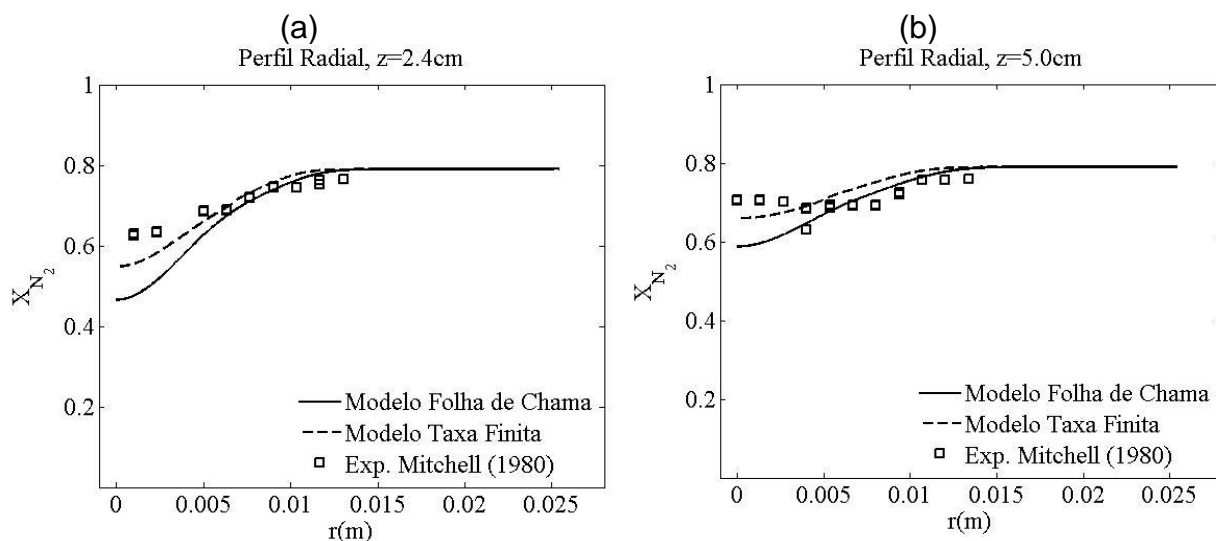


Figura 4.17 - Comparação de perfis em  $z=2,4\text{cm}$  e  $z=5,0$ . (a) e (b) Fração molar de  $\text{N}_2$ . Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).

Para os perfis de  $\text{H}_2\text{O}$  mostrados nas Fig. (4.18a), (4.19a) e (4.20a) é visível que no começo aumenta com a distância radial e atinge o valor máximo (pouco acima de 0,2) e depois decresce até 0, assim como também previsto por Du (2000). Mitchell *et al.* (1980) mostra que os dados experimentais se mostram bem altos devido a recirculação da umidade na câmara de combustão. Nota-se que os valores da simulação e experimentais mostram boa concordância.

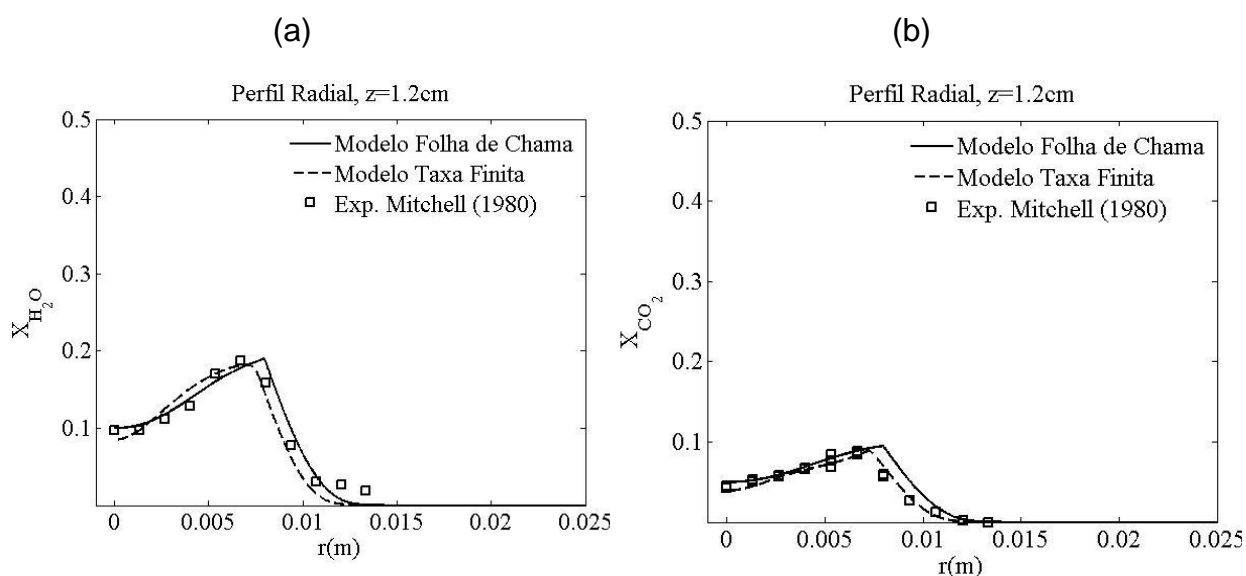


Figura 4.18 - Comparação de perfis em  $z=1,2\text{cm}$ . (a) Fração molar  $\text{H}_2\text{O}$  (b) Fração molar de  $\text{CO}_2$ . Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).

Nos resultados de Konzen, (2010), notou-se também que a diferença em relação aos perfis de  $CO_2$  deve-se a consideração do número de Lewis. Ele ainda considera o Modelo Folha de Chama como um caso limite para geração de resultados, ou seja, não se espera de nenhuma espécie a fração molar maior do que as mostradas por esse modelo.

Na simulação de Uygur (2006) considerando a radiação para a mesma situação, mostra que o valor da temperatura chega mais próximo do valor experimental. Isso acontece devido as espécies de  $CO_2$  e  $H_2O$ , que são importantes para a transferência de calor por radiação (devido a natureza absorvente dessa emissão), porém os resultados não apresentaram grande diferença devido as frações molares serem mais sensíveis ao mecanismo de reação no método de simulação que aos campos de temperatura empregados.

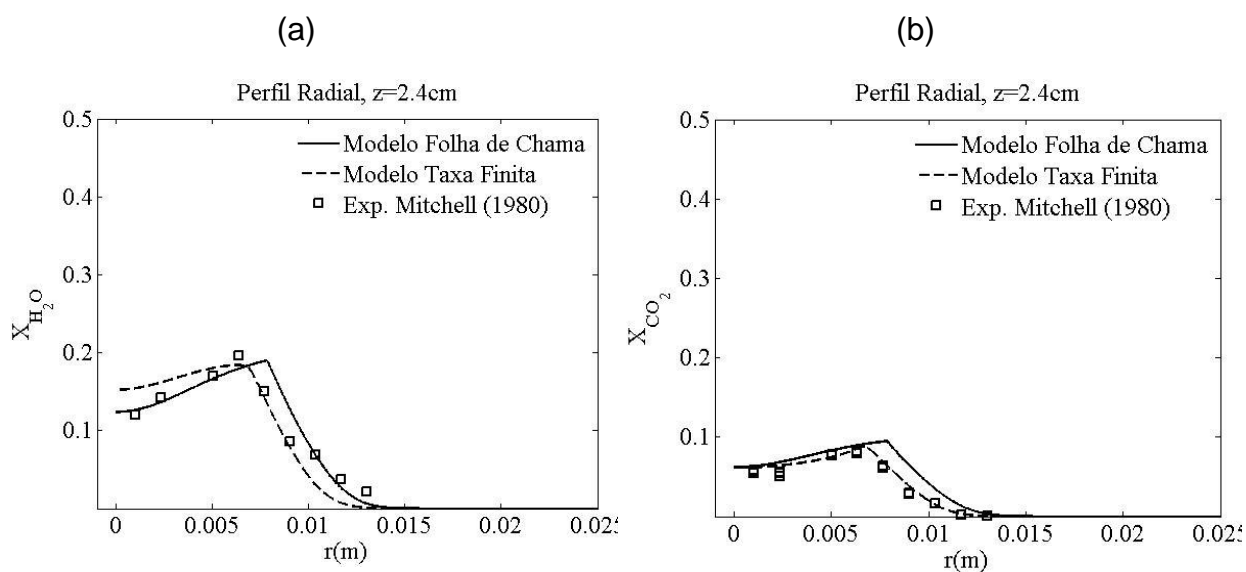


Figura 4.19 - Comparação de perfis em  $z=2,4\text{ cm}$ . (a) Fração molar  $H_2O$  (b) Fração molar  $CO_2$ . Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).

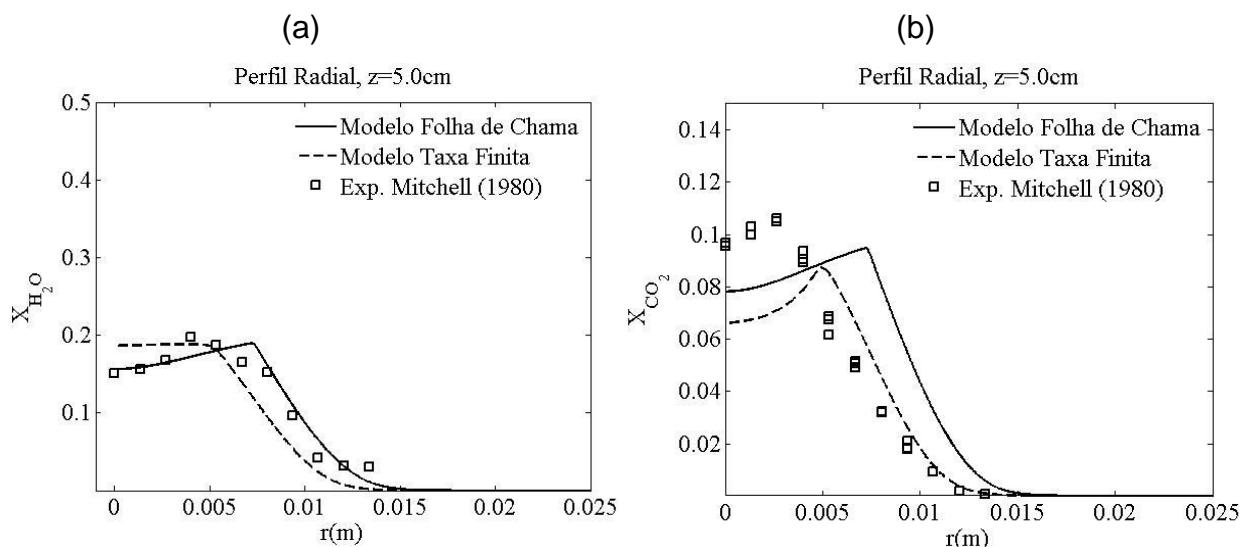


Figura 4.20 - Comparação de perfis em  $z=5,0\text{ cm}$ . (a) Fração molar  $\text{H}_2\text{O}$  (b) Fração molar de  $\text{CO}_2$ . Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).

As baixas temperaturas ( $<1300\text{ K}$ ) o consumo de  $\text{CO}$  é desprezível e espera-se dessa espécie química uma fraca influencia na reação. As altas temperaturas, os átomos de hidrogênio começam a converter  $\text{CO}_2$  para  $\text{CO}$ , resultando em mudanças na taxa de  $\text{CO}/\text{CO}_2$  e na composição do radical  $\text{O}/\text{H}$ , quando comparada a combustão normal. Andersen *et al.* (2008) fala que o mecanismo de WD não consegue prever com acurácia a saída de  $\text{CO}$ , e isso varia com a temperatura.

A oxidação de  $\text{CO}$  é um processo relativamente lento, a menos que espécies químicas contendo hidrogênio estejam presentes. Até mesmo pequenas quantidades de  $\text{H}_2\text{O}$  ou  $\text{H}_2$  podem ter um grande efeito na taxa de oxidação, isso ocorre porque a etapa de oxidação de  $\text{CO}$  envolvendo o radical hidroxila,  $\text{OH}$ , é muito mais rápida do que as etapas envolvendo  $\text{O}_2$  e  $\text{O}$  Turns (2013).

Os perfis de velocidade axial são mostrados nas Fig. (4.21a) (4.21b) e (4.22a). O valor da velocidade passa muito dos valores esperados para  $z=1.2$  e  $5.0$ , isso também foi observado por Tarhan e Selçuk (2003), que utilizou o modelo de folha de chama. Essa informação é consistente, tendo em vista a temperatura também ter sido maior, o que produz mais empuxo. Segundo Du (2000) o modelo de reação química tem um pequeno efeito na velocidade dos gases, porém no presente trabalho isto não é verificado. As diferentes abordagens produziram campos de velocidades bem diferentes.

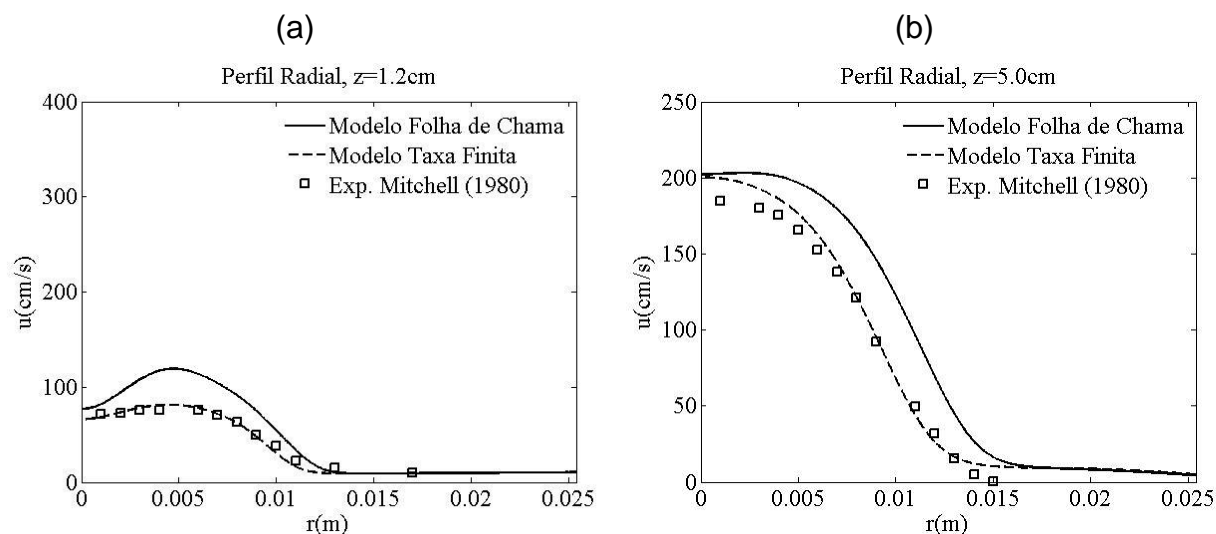


Figura 4.21 - Comparação de perfis em  $z=1,2\text{cm}$  e  $z=5,0\text{cm}$ . (a) e (b) Componente radial de velocidade. Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).

Nos resultados, com modelo de folha de chama, é notada uma recirculação na região de entrada, Fig. 4.22a e Fig. 4.23. Esta recirculação também foi mencionada por Tarhan e Selçuk (2003), que utilizaram o mesmo tipo de modelagem. O valor negativo de velocidade na Fig. 4.22(a) caracteriza a recirculação. Esta característica do campo de velocidades é avaliada como um erro associado ao modelo considerado, já que esses valores não são previstos por dados experimentais e também não estão presentes nos resultados do modelo de taxa finita, ver Fig. 4.23b.

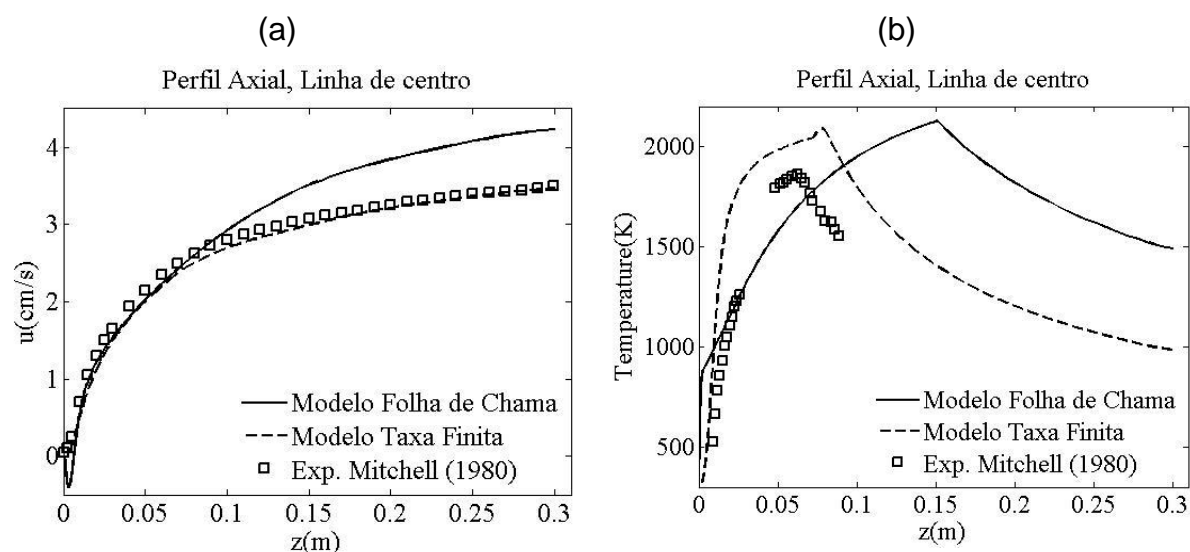


Figura 4.22 - Comparação de perfis no eixo de simetria. (a) Componente axial de velocidade (b) Temperatura. Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).

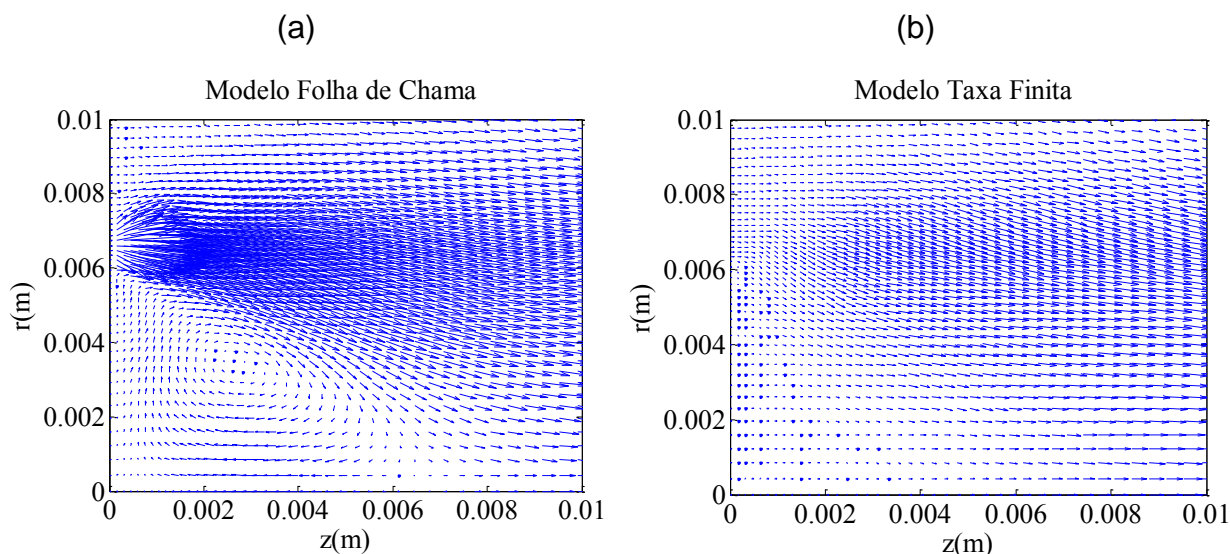


Figura 4.23 – Campo vetorial de velocidades para os dois modelos de combustão.

Perfis radiais de temperatura são mostrados nas Fig. (4.24a) e (4.24b). Nas três posições  $z=1.2$ ,  $5.0$  e no eixo de axissimetria Fig. (4.22b), os valores simulados são diferentes dos encontrados experimentalmente. Isso pode ser causado, de acordo com Tarhan e Selçuk (2003) por aproximações de taxa de reações infinitas no método de folha de chama. Já o método de taxa finita consegue boa acurácia e boa proximidade dos dados experimentais.

Como o Método Folha de Chama assume reação infinitamente rápida e como os reagentes são convertidos diretamente em  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  nesse caso a temperatura máxima passa do registrado experimentalmente, ver Fig 4.24. Na situação onde é considera cinética de taxa finita e como o  $\text{CO}$  e  $\text{H}_2$  estão presentes nos produtos da reação junto com o  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ , a temperatura da chama diminui, conforme apresentado em Du (2000) e visível nos resultados.

O perfil de temperatura para o eixo de simetria alcança valores maiores que os dados experimentais. A altura máxima da chama caracterizada pelo ponto de máxima temperatura encontrada experimentalmente é de 5,8 cm Mitchell *et al.* (1980) e de 12 cm Tarhan e Selçuk (2003), no presente trabalho (Fig. 4.25a) obteve-se o valor de 15 cm para o Método Folha de chama e de 7,5 cm para o Método de Taxa Finita Fig. (4.25b).

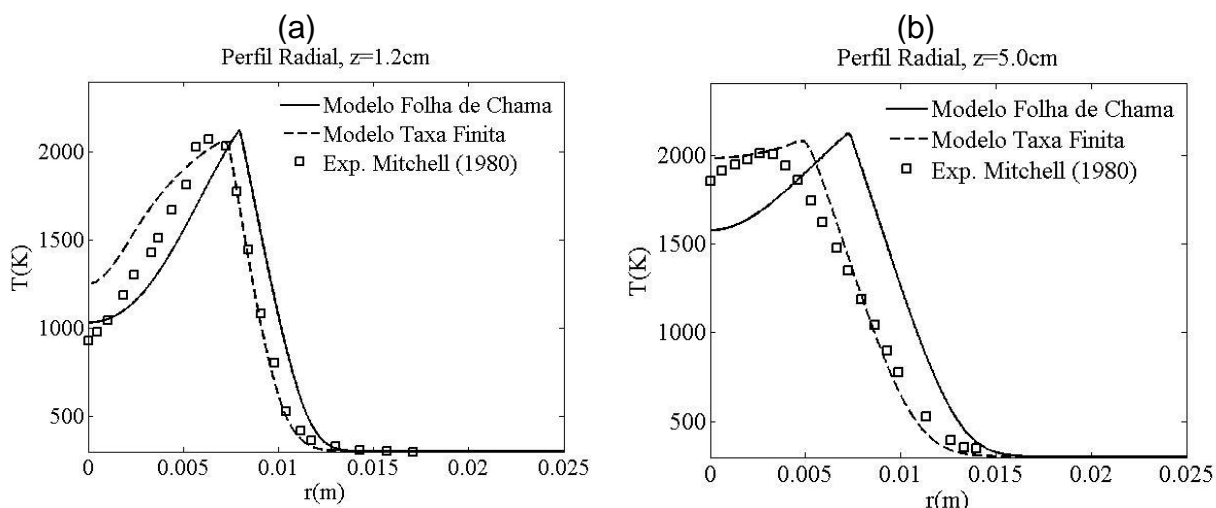


Figura 4.24 - Comparação de perfis em  $z=1,2\text{cm}$  e  $z=5,0\text{cm}$ . (a) e (b) Temperatura. Dados experimentais Mitchell *et al.* (1980).

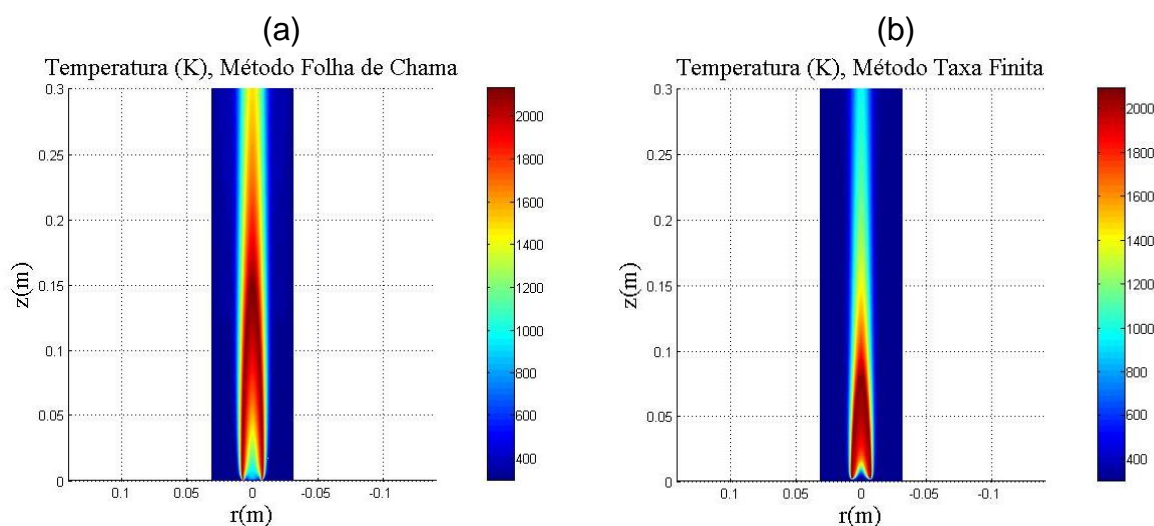


Figura 4.25 - Chama em regime permanente em 2s de simulação. (a) Temperatura (K), Método Folha de Chama e (b) Temperatura (K), Método Taxa Finita.

Uma visão geral do processo transiente de combustão é apresentada na Fig. 4.26. Nota-se, assim que o escoamento começa, imediatamente começa também a reação e a região de alta temperatura, que se estende das entradas de combustível e oxidante até o eixo de simetria, Fig. (4.26a). Com o avanço do escoamento, o campo de temperatura se amplia em direção a parede por causa das recirculações, Fig. (4.26b), (4.26c), (4.26d) e (4.26e). Na região mais afastada da entrada de combustível a temperatura começa a diminuir, pois o combustível deixa de existir por ter sido consumido na reação, Fig. (4.26f), (4.26g), (4.26h) e (4.26i). As formas finais das chamas são vistas nas Fig. (4.25), com gradientes de temperatura bem altos no



sistema. Ao redor da entrada, as temperaturas aumentam de 298K a valores próximos de 2000K em aproximadamente 1 cm. Na direção radial, observa-se que a temperatura diminui e chega a valores próximos do valor de entrada. Esse resultado também foi semelhante ao encontrado por Tarhan e Selçuk (2003).

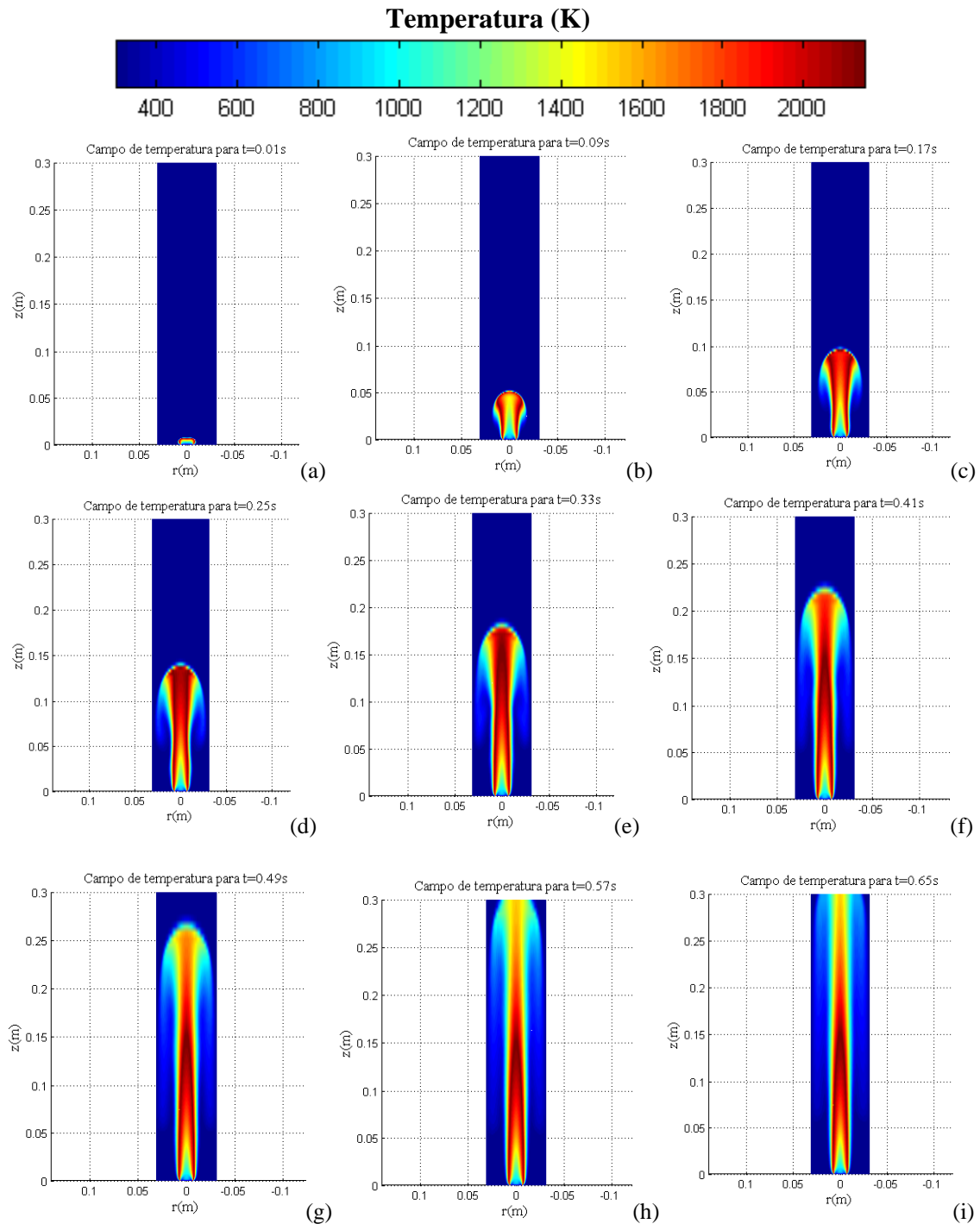


Figura 4.26 - Campo de temperatura variando no tempo; (a) 0,01 s, (b) 0,09 s, (c) 0,17 s, (d) 0,25 s, (e) 0,33 s, (f) 0,41 s, (g) 0,49 s, (h) 0,57 s e (i) 0,65 s - Método Folha de Chama.

## 6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

### 6.1 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

A Modelagem e a simulação da combustão gasosa laminar sem pré-mistura de metano foi apresentada neste trabalho. Sendo assim o Método de Folha de Chama, que usa o conceito de fração de mistura, e o Método de Taxa Finita foram apresentados e discutidos em detalhes.

Os resultados da simulação da chama de metano encontrados foram condizentes com os dados experimentais e mostraram uma boa aproximação. Também foram notados resultados fisicamente inconsistentes, como os valores negativos do perfil de velocidade, devido ao efeito de refluxo. Porém, a maior parte das divergências encontradas era esperada devido às aproximações do método de folha de chama.

Para o modelo de taxa finita, os resultados tiveram uma acurácia muito melhor, especialmente para os perfis de velocidade no eixo de simetria e valor de máxima temperatura, que mesmo considerando poucas reações de espécies químicas para simulação, chegou muito próximo dos dados experimentais.

Segundo observado, acredita-se que o modelo bidimensional adotado pode chegar bem próximos dos valores reais na descrição da chama, porém devido características como a entrada dos reagentes ocorrerem por meio de uma placa perfurada, por exemplo, impossibilita a completa acurácia dos resultados.

Sabe-se que para obter maior precisão e melhores resultados, mais passos, reações químicas e uma malha mais refinada podem ser incluídas no processo ou mesmo transferência de calor por radiação para espécies como  $CO_2$  e  $H_2$ , com a consequência de um maior tempo de processamento e levando em consideração a finalidade dos resultados obtidos. O tempo gasto para o modelo de Taxa Finita foi aproximadamente 13,5 vezes maior que o de Folha de Chama, isso deixa evidente que o modelo Folha de Chama é uma ótima aproximação para aplicações dentro da engenharia, porém para fins científicos que necessitam uma acurácia maior e mais

detalhe das espécies químicas do processo, aconselha-se fazer uso do modelo de Taxa Finita, como também é aconselhado por Fukumasu (2010).

Como sugestões para trabalhos futuros têm-se:

- Implementação no código numérico de um modelo de radiação para dióxido de carbono e água para obtenção de melhores valores da temperatura;
- Aplicação do método de taxa finita para reação mais detalhada da combustão metano-ar e a obtenção de perfis das espécies químicas mais precisos;
- Estudo de reação em cadeia e de ramificação de cadeia da combustão;
- Análise de caminho de reação para baixa e alta temperatura;
- Análise da formação de óxidos de nitrogênio como produto da reação;

## 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Andersen, Jimmy, Rasmussen, Christian Lund, Giselsson Trine, and Glarborg, Peter, 2008, "Global Combustion Mechanisms for Use in CFD Modeling under Oxy-Fuel Conditions", Department of Chemical and Biochemical Engineering Technical University of Denmark, DK-2800 Kgs. Lyngby, Denmark.
- Balanço Energetico Nacional 2014 - Relatório Final, Ano base 2013, Empresa de pesquisa Energetica (EPE), Ministério de Minas e Energia (MME), pp. 23 24
- Barreto, Eduardo J. F., Rendeiro, G., Nogueira, M., 2008, "Combustão e Gasificação de Biomassa Sólida- Soluções Energéticas para a Amazônia", Programa Luz para Todos, Ministerio de Minas e Energia.
- Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N., 2002, "Transport Phenomena", 2nd edn, John Wiley & Sons, New York.
- Bollig et al., 1998, "A simplified approach to the numerical description of methane-air diffusion flames", Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute.
- Cunha, Fábio A. da (2010). "Modelo matemático para estudo de processos reativos de partículas de carvão e biomassa". Faculdade de Tecnologia, Departamento de Engenharia Mecânica, UnB, Mecânica dos fluidos, Brasília, Brasil.
- Dias, F. L. G., 2011, "Projeto Preliminar e Simulação Computacional de Câmara de Combustão de Turbina a Gás Considerando a Queima de Biocombustíveis" Itajuba, Minas Gerais, Brasil. pp 30-83.
- Dreizler, A. e Janicka, J., 2007, "Technische Verbrennung - Grundlagen zur Technologieverbesserung", Thema Forschung, TU Darmstadt, Deutschland
- Dryer, F. L. and Glassman, I., HIGH-TEMPERATURE OXIDATION OF CO AND CH<sub>4</sub> Guggenheim Laboratories, Princeton University, Princeton, New Jersey.
- Du, J., 2000, "Combustion CFD Simulation" Faculté des Sciences et de Génie, Université Laval Québec, Canada, pp. 122 - 149.
- Filho, F. L. S., 2011, " Simulações de Chamas Turbulentas de Etanol com Modelo de Turbulência K-  $\epsilon$ ", Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, pp. 19-23.
- Flogan, Richard C., Seinfeld, John H.. 1988, Fundamentals of Air Pollution Engineering, California Institute of Technology.
- Fukumasu, N. K., 2010, "Modelagemde uma Chama de Difusão Turbulenta para Simulação de Grandes Escalas", São Paulo, Brasil, pp 29 - 36.
- Galletti Chiara, Coraggio, Giovanni, Tognotti, Leonardo, 2013, "Numerical investigation of oxy-natural-gas combustion in a semi-industrial furnace: Validation

- of CFD sub-models”, Dipartimento di Ingegneria Civile e Industriale, Università di Pisa, Pisa, Italy - International Flame Research Foundation, Livorno, Italy.
- Howard et al., “Fine Kinetics of Carbon Monoxide Oxidation in Postflame Gases”, Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts.
- Jones, W. P. and Lindstedt, R. P., 1988, “Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion”, Department of Chemical Engineering and Chemical Technology, Imperial College, London SW7 2BY, England.
- Konzen, Pedro Henrique de Almeida, 2010, "Simulação Numérica de Chama Laminar Axisimétrica de Metano/Ar usando REDIM", Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS.
- Law, C. K., 2006, "Combustion Physics", Cambridge University Press, New York.
- Mitchell, R. E., 1975, "Nitrogen Oxide Formation in Laminar Methane-Air Diffusion Flames", Massachusetts Institute of Technology.
- Mitchell, R.E., Saro, A. F. e Clomburg, L.A., 1980, "Experimental and Numerical Investigation of Confined Laminar Diffusion Flames", *Combust.Flame*, 37, pp 227-244.
- Mossi, A., 2011, "Modelagem da Radiação Térmica em Chamas Laminares da Combustão de Metano em Ar". Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil.
- Sauer, V. M., Leiroz, A. J. K. e Colaço, M. J., 2012, "Analysis of Biofuels Reacting Flows in Ducts", 14th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, RJ, Brazil
- Patankar, S. V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere-McGraw-Hill, Washington, DC.
- Peters, N., 1992, "Fifteen Lectures on Laminar and Turbulent Combustion", RWTH Aachen, Ercoftac Summer School, Aachen, Germany.
- Ranade, V. R., 2002, "Computational Flow Modeling For Chemical Reactor Engineering Process Systems Engineering", Volume 5.
- Tarhan, T. and Selçuk, N., 2003, "Numerical Simulation of a Confined Methane/Air Laminar Diffusion Flame by the Method of Lines", Middle East Technical University, Chemical Engineering Department, Ankara-Turkey.
- Taylor, R. L., 2002, "The Finite Element Method". 5th. Oxford: Butterworth-Heinemann.
- Turns, Stephen R., 2023, "An Introduction to Combustion: Concepts and Applications", 3<sup>rd</sup> Edition.

- Uygur, A. B., Tarhan, t., Selçuk, N., 2006, "Transient simulation of reacting radiating flows" Department of Chemical Engineering, Middle East Technical University, Ankara, Turkey.
- Versteeg H. K., Malalasekera W., 2007, "An introduction to Computational Fluid Dynamic - The Finite volume Method", 2<sup>o</sup>Edition, pp. 263-275.
- Warnatz, J., Maas, U. and Dibble, R.W., 2006, "Combustion - Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation", 4th Edition, pp. 4-8.
- Westbrook, Charles K., Dryer, Frederick L., 1981, "Simplified Reaction Mechanisms for the oxidation of hzdrocarbon fuels in Flames".
- Zeng, W.R. and Chow, W.K., 2011, "A Note On Modeling Combustion Of Common Fuels With Mixture Fraction", International Journal on Engineering Performance-Based Fire Codes, pp.1-2.